

Mémoire en vue de présenter une

**THÈSE**

devant

**L'ECOLE CENTRALE DE LYON**

Ecole doctorale MEGA : Mécanique-Energétique-Génie civil-Acoustique

**MODELISATION DIRECTE ET INVERSE DE LA DISPERSION ATMOSPHERIQUE EN  
MILIEUX COMPLEXES**

pour obtenir le titre de **DOCTEUR**

Spécialité : Mécanique

Par

**Nabil BEN SALEM**

Soutenance le 17 septembre 2014 devant la commission d'examen :

Pr. Marc BOCQUET	Ecole des Ponts ParisTech, CEREAs, France	Président, Rapporteur
Pr. Alan ROBINS	University of Surrey, United Kingdom	Rapporteur
Dr. Anda IONESCU	CERTES, Université Paris-Est Créteil, France	Examinatrice
Dr. Grégory TURBELIN	University d'Evry-Val-d'Essonne, France	Examineur
Pr. Richard PERKINS	Ecole Centrale de Lyon, LMFA, France	Directeur de thèse
Dr. Lionel SOULHAC	Ecole Centrale de Lyon, LMFA, France	Co-directeur de thèse
Dr. Pietro SALIZZONI	Ecole Centrale de Lyon, LMFA, France	Co-directeur de thèse

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique



***A la mémoire de mon frère Nawfel  
à mes chers parents, à mes frères  
à mon épouse et à ma petite Yara***



***« Puisqu'on ne peut changer  
la direction du vent, il faut  
apprendre à orienter les  
voiles »***

***[James Dean]***



---

# Remerciements

---

Ce travail de recherche a été effectué au sein du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon avec un financement de la région Rhône Alpes. J'adresse en premier lieu mes plus vifs remerciements à la région Rhône Alpes pour avoir financé ce travail. Je remercie également le gouvernement Tunisien et le ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique pour la bourse sans laquelle je n'aurais pas pu continuer mes études de 3<sup>ème</sup> cycle en France.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude au Professeur Alan ROBINS et au Professeur Marc BOCQUET pour avoir accepté d'être rapporteurs de mon travail de thèse et pour l'analyse qu'ils ont pu en faire. Je remercie encore Monsieur Marc BOCQUET qui m'a fait l'honneur de présider mon jury. Je voudrais aussi remercier les docteurs Anda IONESCU et Grégory TURBELIN d'avoir accepté d'être membres du jury et pour l'intérêt qu'ils ont montré à mon travail.

Un grand merci à mes directeurs de thèse Lionel SOULHAC et Richard PERKINS, pour avoir cru en moi. Ma réussite passait par la confiance en me donnant la possibilité de montrer mes capacités et mes envies.

Merci Lionel, pour m'avoir appris pas mal de choses sur la problématique de la dispersion atmosphérique, pour avoir pris en considération mon avis à chaque fois, pour m'avoir laissé beaucoup de liberté tout en étant présent quand le besoin s'en faisait ressentir, et surtout pour m'avoir accordé votre confiance pour participer à des prestations industrielles applicatives.

Merci Lionel, pour m'avoir donné cette occasion d'intégrer votre équipe, pour m'avoir soutenu pendant et après la thèse. Je salue toute votre qualité morale que vous avez bien voulu mettre à mon service. J'ai appris beaucoup de vous.

Je remercie également mon encadrant Pietro SALIZZONI, d'avoir participé activement à la réalisation et à la valorisation de ce travail, pour m'avoir aidé à rédiger tous les articles scientifiques publiés en anglais. Merci Pietro, pour vos idées originales, pour votre disponibilité absolue et surtout pour vos « coups de téléphone » et pour votre soutien moral tout au long de ma thèse.

Je tiens à remercier l'ensemble du personnel, doctorants et stagiaires, du laboratoire LMFA pour leur présence et leur sympathie. J'ai eu beaucoup de plaisir à travailler parmi vous.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur Michel LANCE pour m'avoir accueilli dans son laboratoire de recherche. Merci à Monsieur Faouzi LAADHARI, pour m'avoir soutenu et encouragé à finir ce travail. Un grand MERCI à Monsieur Philippe EYRAUD pour sa contribution active dans l'accomplissement de ce travail à travers ses recherches bibliographiques.

Je remercie chaleureusement toutes les personnes de l'équipe AIR du LMFA qui m'ont apporté leur aide et leur amitié durant 4 ans et demi que j'ai passés avec eux.

Merci Patrick MEJEAN pour vos encouragements, pour votre accompagnement matinal au labo et surtout pour votre travail héroïque dans la lecture et la correction de mon manuscrit ; merci Massimo MARRO, Guillevic LAMAISON, Perrine VOLTA et François-Xavier CIERCO pour votre disponibilité et vos éclaircissements scientifiques sur certains points abordés dans mon travail. Maintenant je voudrais remercier tous les doctorants de notre équipe : Radi SADEK, Chiara NIRONI, Hervé GAMEL, Julien LE CLANCHE et Chi-vuong qui m'ont beaucoup soutenu pendant cette aventure.

Je remercie chaleureusement tous les personnels de l'association agréée de la qualité de l'air Air Rhône-Alpes et surtout Madame Marie-Blanche PERSONNAZ pour m'avoir accueilli dans leur établissement. Un grand MERCI à mon équipe de travail et à mes collègues de bureau « MOD » d'Air Rhône-Alpes de s'être mobilisés pour assister à ma soutenance de thèse. Merci à mon « parrain » Harry DUPONT ;) ; Merci à Steve MICALLEF « dieu de Krigeage », Merci à Charles-Elie PETITJEAN et à Ariane PROVENT mon ex-trinôme de bureau au LMFA. Enfin un grand MERCI à notre chef Florence TROUDE pour avoir cru en moi et pour m'avoir soutenu et encouragé dans les moments difficiles de la fin de ma thèse.

Je n'oublie pas aussi de remercier l'ensemble des membres de l'équipe Énergie et Pollution de l'Air de l'Institut Français des Sciences et Technologies des Transports, de l'Aménagement et des Réseaux (IFSTTAR) de Bron qui m'ont aidé chacun à leur façon et avec qui j'ai passé de bons moments. Merci à Michel ANDRE, de m'avoir bien accueilli au sein de leur équipe et pour m'avoir soutenu et encouragé d'aller jusqu'au bout de ce travail.

Je veux également remercier mes parents, mes deux frères et ma petite famille qui m'ont beaucoup encouragé et soutenu dans mes moments de découragement. Je remercie ma chère épouse pour son soutien quotidien indéfectible et son enthousiasme contagieux à l'égard de mes travaux comme de la vie en général.

Finalement, j'adresse un merci collectif à tout le reste des personnes qui ont participé de manière « directe » ou « indirecte » dans cette réussite et qui m'ont permis de terminer une étape importante et de projeter un avenir que je souhaiterais prospère dans ma carrière scientifique.

---

# Résumé

---

La modélisation inverse de la dispersion atmosphérique consiste à reconstruire les caractéristiques d'une source (quantité de polluants rejetée, position) à partir de mesures de concentration dans l'air, en utilisant un modèle direct de dispersion et un algorithme d'inversion.

Nous avons utilisé dans cette étude deux modèles directs de dispersion atmosphérique SIRANE (Soulhac, 2000; Soulhac et al., 2011) et SIRANERISK (Cierco et Soulhac, 2009a; Lamaison et al., 2011a, 2011b). Il s'agit de deux modèles opérationnels de « réseau des rues », basés sur le calcul du bilan de masse à différents niveaux du réseau. Leur concept permet de décrire correctement les différents phénomènes physiques de dispersion et de transport de la pollution atmosphérique dans des réseaux urbains complexes. L'étude de validation de ces deux modèles directs de dispersion a été effectuée après avoir évalué la fiabilité des paramétrages adoptés pour simuler les échanges verticaux entre la canopée et l'atmosphère, les transferts aux intersections de rues et la canalisation de l'écoulement à l'intérieur du réseau de rues. Pour cela, nous avons utilisé des mesures en soufflerie effectuées dans plusieurs configurations académiques.

Nous avons développé au cours de cette thèse un système de modélisation inverse de dispersion atmosphérique (nommé ReWind) qui consiste à déterminer les caractéristiques d'une source de polluant (débit, position) à partir des concentrations mesurées, en résolvant numériquement le système matriciel linéaire qui relie le vecteur des débits au vecteur des concentrations. La fiabilité des résultats et l'optimisation des temps de calcul d'inversion sont assurées par le couplage de plusieurs méthodes mathématiques de résolution et d'optimisation, bien adaptées pour traiter le cas des problèmes mal posés. L'étude de sensibilité de cet algorithme d'inversion à certains paramètres d'entrée (comme les conditions météorologiques, les positions des récepteurs,...) a été effectuée en utilisant des observations synthétiques (fictives) fournies par le modèle direct de dispersion atmosphérique.

La spécificité des travaux entrepris dans le cadre de ce travail a consisté à appliquer ReWind dans des configurations complexes de quartier urbain, et à utiliser toute la variabilité turbulente des mesures expérimentales obtenues en soufflerie pour qualifier ses performances à reconstruire les paramètres sources dans des conditions représentatives de situations de crise en milieu urbain ou industriel. L'application de l'approche inverse en utilisant des signaux instantanés de concentration mesurés en soufflerie plutôt que des valeurs moyennes, a montré que le modèle ReWind fournit des résultats d'inversion qui sont globalement satisfaisants et particulièrement encourageants en termes de reproduction de la quantité de masse totale de polluant rejetée dans l'atmosphère. Cependant, l'algorithme présente quelques difficultés pour estimer à la fois le débit et la position de la source dans certains cas. En effet, les résultats de l'inversion sont assez influencés par le critère de recherche (d'optimisation), le nombre de récepteurs impactés par le panache, la qualité des observations et la fiabilité du modèle direct de dispersion atmosphérique.

**Mots clés** : Dispersion atmosphérique, expériences en soufflerie, modélisation inverse, méthodes de régularisation, rejets accidentels, canopée urbaine.



---

# Abstract

---

The aim of this study is to develop an inverse atmospheric dispersion model for crisis management in urban areas and industrial sites. The inverse modes allows for the reconstruction of the characteristics of a pollutant source (emission rate, position) from concentration measurements, by combining a direct dispersion model and an inversion algorithm, and assuming as known both site topography and meteorological conditions.

The direct models used in these study, named SIRANE and SIRANERISK, are both operational "street network" models. These are based on the decomposition of the urban atmosphere into two sub-domains: the urban boundary layer and the urban canopy, represented as a series of interconnected boxes. Parametric laws govern the mass exchanges between the boxes under the assumption that the pollutant dispersion within the canopy can be fully simulated by modelling three main bulk transfer phenomena: channelling along street axes, transfers at street intersections and vertical exchange between a street canyon and the overlying atmosphere. The first part of this study is devoted to a detailed validation of these direct models in order to test the parameterisations implemented in them. This is achieved by comparing their outputs with wind tunnel experiments of the dispersion of steady and unsteady pollutant releases in idealised urban geometries.

In the second part we use these models and experiments to test the performances of an inversion algorithm, named REWind. The specificity of this work is twofold. The first concerns the application of the inversion algorithm

- using as input data instantaneous concentration signals registered at fixed receptors and not only time-averaged or ensemble averaged concentrations.
- in urban like geometries, using an operational urban dispersion model as direct model.

The application of the inverse approach by using instantaneous concentration signals rather than the averaged concentrations showed that the ReWind model generally provides reliable estimates of the total pollutant mass discharged at the source. However, the algorithm has some difficulties in estimating both emission rate and position of the source. We also show that the performances of the inversion algorithm are significantly influenced by the cost function used to the optimization, the number of receptors and the parameterizations adopted in the direct atmospheric dispersion model.

**Keywords:** Atmospheric dispersion, wind tunnel experiments, inverse modelling, regularization methods, accidental releases, urban canopy.



---

# Table des matières

---

<b>Remerciements</b> .....	<b>7</b>
<b>Résumé</b> .....	<b>9</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>11</b>
<b>Introduction générale</b> .....	<b>17</b>
<b>Première partie : Généralités</b> .....	<b>23</b>
<b>I.1. Principe et outils de la modélisation inverse</b> .....	<b>25</b>
I.1.1. Introduction.....	25
I.1.2. Principe d'application de la modélisation inverse.....	25
I.1.3. Outils de la modélisation inverse .....	26
I.1.3.1. Modèles de prévision ou modèles physiques .....	26
I.1.3.2. Observations.....	27
I.1.3.3. Algorithme d'inversion .....	28
I.1.4. Références.....	29
<b>I.2. Présentation générale de l'étude</b> .....	<b>35</b>
I.2.1. Problématique : application de la modélisation inverse aux milieux complexe .....	35
I.2.2. Questions scientifiques et originalité.....	36
I.2.3. Choix de l'utilisation des modèles SIRANE/SIRANERISK.....	37
I.2.3.1. Modèles rue-canyon.....	37
I.2.3.2. Modèles réseau des rues.....	38
I.2.3.3. Modèles CFD et CFD « simplifiés » .....	38
I.2.4. Démarche adoptée.....	39
I.2.4.1. Validation des modèles directs de dispersion atmosphérique .....	39
I.2.4.2. Développement de l'algorithme inverse.....	39
I.2.4.3. Etude de sensibilité de la méthode inverse .....	39
I.2.4.4. Application du système de modélisation inverse avec des mesures .....	39
I.2.5. Références.....	40
<b>Deuxième partie : Modélisation directe de la dispersion atmosphérique</b> .....	<b>43</b>
<b>II.1. Modélisation d'un écoulement stationnaire dans un réseau de rues</b> .....	<b>45</b>
II.1.1. Abstract .....	45
II.1.2. Introduction.....	45
II.1.3. Description of the model SIRANE .....	47
II.1.3.1. Flow and dispersion above the urban canopy .....	47
II.1.3.2. Flow and dispersion within the urban canopy .....	48
II.1.3.2.1. The street network approach.....	48
II.1.3.2.2. Average velocity within the street: $U_{street}$ .....	49
II.1.3.2.3. Pollutant fluxes at street intersections: $Q_E$ .....	49
II.1.3.2.4. Turbulent fluxes between street and atmosphere: $Q_{turb}$ .....	50
II.1.4. Experiments.....	51
II.1.5. Setting of the model parameters .....	54

II.1.5.1.	Flow and dispersion above the roof level .....	54
II.1.5.2.	Urban canopy .....	55
II.1.5.2.1.	Velocity within the street canyon .....	55
II.1.5.2.2.	Horizontal wind fluctuations .....	56
II.1.5.2.3.	Vertical exchange velocity $u_d$ .....	56
II.1.6.	Results .....	57
II.1.6.1.	The optimal simulations .....	58
II.1.6.2.	Dependence on the model for $U_{street}$ .....	64
II.1.6.3.	Sensitivity to variations of $u_d$ and $\sigma_\phi$ .....	65
II.1.6.4.	Discussion on reliability of the statistical indices .....	68
II.1.7.	Conclusion .....	69
II.1.8.	Bibliography .....	70
<b>II.2.</b>	<b>Modélisation de la dispersion d'un rejet instationnaire en milieu urbain.....</b>	<b>75</b>
II.2.1.	Introduction.....	75
II.2.2.	Présentation du modèle SIRANERISK .....	77
II.2.2.1.	Dispersion dans la canopée urbaine .....	77
II.2.2.1.1.	SIRANE vs SIRANERISK .....	77
II.2.2.1.2.	Traitement spécifique de l'advection le long des rues .....	79
II.2.2.2.	Dispersion dans la couche limite atmosphérique .....	79
II.2.2.2.1.	Cisaillement uniforme .....	81
II.2.2.2.2.	Cisaillement non-uniforme et application à la couche limite .....	83
II.2.2.2.3.	Résolution analytique dans le cas d'un écoulement stationnaire .....	85
II.2.2.2.3.1.	Étalement vertical de la bouffée et loi universelle d'évolution du temps Lagrangien .....	85
II.2.2.2.3.2.	Ecart-type transversal .....	86
II.2.2.2.3.3.	Ecart-type longitudinal.....	86
II.2.2.2.3.4.	Vitesse d'advection et position longitudinale du centre de masse .....	86
II.2.3.	Expériences en soufflerie .....	87
II.2.3.1.	Rejets continus dans un milieu urbain (Garbero et al., 2010b).....	88
II.2.3.2.	Rejets de courte durée dans un milieu urbain (F.-X. Cierco et al., 2008).....	88
II.2.3.2.1.	Campagne de mesure R (R20 et R50).....	88
II.2.3.2.2.	Campagne de mesure B (B30 et B45).....	90
II.2.4.	Validation du modèle direct SIRANERISK .....	90
II.2.4.1.	Sol rugueux.....	90
II.2.4.2.	Canopée urbaine .....	96
II.2.4.2.1.	Rejets stationnaires.....	96
II.2.4.2.2.	Rejets instationnaires.....	103
II.2.5.	Conclusions.....	106
II.2.6.	Références.....	107
<b>Troisième partie : Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique .....</b>	<b>109</b>	
<b>III.1. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique : Etat de l'art.....</b>	<b>111</b>	
III.1.1.	Méthodes d'Assimilation de données (AD).....	111
III.1.1.1.	Interpolation statistique optimale et analyse BLUE :Best Linear Unbiased Estimation.....	112
III.1.1.2.	Méthodes d'AD séquentielles .....	113
III.1.1.2.1.	Filtre de Kalman .....	114
III.1.1.2.2.	Filtre de Kalman Étendu (FKE).....	115
III.1.1.2.3.	Filtre de Kalman d'ensemble.....	115
III.1.1.3.	Méthodes variationnelles.....	115
III.1.1.3.1.	Méthodes variationnelles 3D-Var .....	116
III.1.1.3.2.	Méthodes variationnelles 4D-Var .....	116
III.1.1.3.3.	Modélisation adjointe .....	117
III.1.2.	Autres techniques utilisées dans l'inversion .....	118

III.1.2.1. Approche bayésienne et méthodes de Monte Carlo .....	118
III.1.2.2. Méthodes d'optimisation .....	120
III.1.2.3. Utilité de la régularisation .....	121
III.1.3. Autres approches .....	122
III.1.4. Références .....	122
<b>III.2. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique : Algorithme de recherche du débit d'une source de position connue .....</b>	<b>129</b>
III.2.1. Généralités .....	129
III.2.2. Formulation du problème inverse de dispersion atmosphérique .....	130
III.2.2.1. Description et formulation du problème .....	130
III.2.2.2. Calcul de la matrice CTA .....	132
III.2.2.3. Algorithme et méthodes de résolution .....	132
III.2.2.3.1. Problème bien posé .....	132
III.2.2.3.2. Problème mal posé .....	134
III.2.2.3.2.1. Problème surdéterminé .....	134
III.2.2.3.2.2. Problème sous-déterminé .....	135
III.2.2.3.3. Problème mal défini .....	136
III.2.2.3.4. Régularisation par pénalisation .....	138
III.2.3. Etude de sensibilité de l'algorithme inverse .....	140
III.2.3.1. Scénario de base .....	141
III.2.3.2. Sensibilité par rapport à la position des récepteurs .....	141
III.2.3.3. Sensibilité par rapport au pas de temps d'observation .....	145
III.2.3.4. Sensibilité à la direction du vent .....	149
III.2.3.5. Bruitage du signal d'observation .....	150
III.2.4. Conclusion .....	153
III.2.5. Références .....	153
<b>Quatrième partie : Application de la modélisation inverse dans les milieux complexes .....</b>	<b>157</b>
<b>IV.1. Application de la modélisation inverse pour reconstruire les émissions de rejets accidentels à partir de signaux temporels de concentration .....</b>	<b>159</b>
IV.1.1. Introduction .....	159
IV.1.2. Outils d'application .....	160
IV.1.2.1. Observations : Essais de Cierco et al. (2008) .....	160
IV.1.2.2. Modèle physique direct : SIRANERISK .....	161
IV.1.3. Recherche du débit d'une source connue .....	161
IV.1.3.1. Inversion sur sol rugueux .....	163
IV.1.3.1.1. Résultats d'inversion sur sol rugueux .....	165
IV.1.3.1.2. Etude de sensibilité .....	168
IV.1.3.2. Inversion dans le quartier .....	173
IV.1.3.2.1. Présentation des scénarios .....	173
IV.1.3.2.2. Résultats d'inversion dans un quartier idéalisé .....	173
IV.1.4. Choix du paramètre de régularisation .....	177
IV.1.4.1. Présentation des méthodes à tester .....	178
IV.1.4.2. Choix de la méthode .....	180
IV.1.5. Conclusion .....	187
IV.1.6. Références .....	188
<b>IV.2. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique: Algorithme de recherche de la position de la source .....</b>	<b>191</b>
IV.2.1. Introduction .....	191
IV.2.2. Algorithme inverse .....	191
IV.2.2.1. Principe de base de la méthode de recherche en grille .....	191
IV.2.2.2. Méthode de la « recherche en grille » modifiée .....	192
IV.2.3. Test des fonctions coût .....	194

IV.2.3.1. Scénario de base.....	194
IV.2.3.2. Erreur relative maximale de l'émission totale .....	195
IV.2.3.3. Moyenne de l'erreur relative maximale.....	197
IV.2.3.4. Moyenne de l'erreur relative maximale normalisée par la quantité de masse totale.	198
IV.2.4. Etude de sensibilité aux emplacements des récepteurs.....	201
IV.2.5. Application au milieu urbain .....	207
IV.2.5.1. Outils d'application de la modélisation inverse .....	208
IV.2.5.1.1. Observation : Essais de Garbero et al. (2010) .....	208
IV.2.5.1.2. Modèle SIRANE.....	209
IV.2.5.2. Scénarios de base .....	209
IV.2.5.3. Résultats .....	210
IV.2.6. Conclusions.....	216
IV.2.7. Références.....	216
<b>Conclusions et perspectives .....</b>	<b>219</b>
Conclusions.....	219
Perspectives.....	221

---

# Introduction générale

---

L'amélioration de la qualité de l'air, dans les zones urbaines et industrielles, est devenue de plus en plus un enjeu environnemental pour les autorités politiques et scientifiques. Ainsi, la gestion des risques, associés aux rejets de polluants atmosphériques dans ces environnements complexes, constitue une préoccupation majeure pour assurer la sécurité des riverains. La modélisation de la dispersion atmosphérique en milieux complexes s'est avérée être une approche très utile pour répondre à ces enjeux et a fait l'objet de nombreuses études numériques et expérimentales dans les trente dernières années (Carruthers et al., 2000; Hertel et Berkowicz, 1989; Robins et Apsley, 2000; Sacre et al., 1995; Soulhac et al., 2008). De même, suite à la dernière indication de l'Organisation Mondiale de la Santé, qui a classé la pollution de l'air extérieur comme cancérigène pour l'homme (IARC, 2013), l'utilisation de ces modèles et l'installation de réseaux de mesures de concentration seront de plus en plus nécessaires pour prévoir l'impact des différentes sources de pollution sur la santé et l'environnement. En effet, les modèles directs de dispersion atmosphérique permettent d'étudier l'évolution temporelle et spatiale de la pollution atmosphérique et l'impact des sources de pollution en fournissant des cartographies spatio-temporelles des prévisions de la qualité de l'air.

Malheureusement, comme tous les codes numériques, la fiabilité des résultats des modèles directs est fortement liée à la qualité des paramètres d'entrée et notamment les caractéristiques du terme source qui sont encore difficilement quantifiables par des mesures directes. En effet, les débits d'émission sont souvent calculés par des méthodes génériques en utilisant des facteurs d'émissions mal définis ou des cadastres d'émissions (inventaires) souvent imprécis (Bouscaren, 2010; Han et al., 2007; Ionescu, 2010). Par exemple, Han et al. (2007) considèrent que les incertitudes sur les inventaires des émissions peuvent facilement atteindre 30%.

Il est clair que la reconstruction des paramètres de la source permettrait d'améliorer sensiblement les résultats des modèles directs de dispersion atmosphérique et en conséquence d'avoir un bon fonctionnement des systèmes d'intervention qui sont mis en place pour les situations d'urgence (accidents industriels tels que l'accident d'Algeciras en Espagne (1998), Tchernobyl (1986) ou attentats terroristes comme ceux de 11 septembre 2001, incendies...). En effet, une bonne connaissance de la source permettra de prendre les meilleures décisions de gestion des situations de crise en temps réel.

D'après ce qui précède, il est donc nécessaire d'utiliser d'autres techniques comme celle de la modélisation inverse pour bien répondre à ces objectifs. Ces approches permettent en particulier de reconstruire les paramètres des sources en identifiant leurs positions et leurs débits massiques d'émission. Dans ce cas, le problème est posé à l'inverse et les scientifiques ont recours à des approches plus complexes et plus sophistiquées qui ont été développées pour estimer les émissions

et identifier les positions des sources en utilisant des modèles directs de la dispersion atmosphérique et des mesures de concentration des polluants dans l'air.

Bien que l'application de la modélisation inverse aux échelles locale et régionale date des années quatre-vingt-dix (Mulholland et Seinfeld, 1995; Wilson et Shum, 1992), l'utilisation de ces techniques reste rare en milieu urbain, à micro échelle (Chow et al., 2008; Keats et al., 2007a; Lushi et Stockie, 2010; Yee et al., 2008). Dans ces travaux, les techniques de modélisation inverse ont été couplées avec différents modèles directs tels que des codes CFD et des modèles gaussiens de dispersion qui ont mis en évidence des limitations majeures pour la gestion des risques dans les environnements complexes. Par exemple, les codes CFD nécessitent des temps de calcul longs, qui ne sont pas compatibles avec l'étude d'un grand nombre de scénarios ou les situations de crises. D'autre part, les résultats des modèles gaussiens sont affectés par des erreurs significatives dues à la simplification du champ de vitesse, si bien que ces modèles ne sont pas en mesure de simuler correctement la canalisation de l'écoulement dans la canopée urbaine et les effets locaux dus aux obstacles.

L'objectif de notre travail a donc été de développer une méthode inverse capable de reconstruire les paramètres d'une source de pollution dans des milieux complexes en utilisant tous les types de modèles de dispersion atmosphérique sans que leurs concepts théoriques soient une limitation. La méthode inverse doit être apte à identifier les paramètres de la source (débit et position) dans des configurations complexes (des milieux urbains et industriels) en utilisant des observations brutes caractérisées par toute leur variabilité turbulente. L'algorithme développé dans cette étude repose sur une formulation linéaire du problème inverse en profitant de la linéarité qui relie les concentrations mesurées aux émissions des sources de pollution. Cette hypothèse de linéarité n'est valable qu'en supposant que les processus chimiques sont absents, hypothèse couramment effectuée pour modéliser des rejets accidentels ou pour des impacts à micro-échelle. Le traitement du problème est effectué suivant les dimensions et la nature du système inverse (sous-déterminé, surdéterminé,...). La méthode utilisée a été classée comme un cas particulier d'une méthode d'assimilation de données (Bocquet, 2010; Jeong et al., 2005). Il s'agit en grande partie d'un problème de moindres carrés dont l'objectif est de minimiser l'écart entre les mesures des concentrations et les résultats théoriques du modèle direct de dispersion atmosphérique. Ces méthodes de moindres carrés ont été largement utilisées depuis les années soixante pour inverser des problèmes géophysiques et météorologiques (Askan et al., 2010; Backus et Gilbert, 1967; Kanasevich et Chiu, 1985; Lewis et Derber, 1985; Lewis et al., 2006; Lines et Treitel, 1984; Richardson et Zandt, 2009). Ces techniques ont également été utilisées dans les dernières décennies pour identifier des sources de pollution atmosphérique (Issartel et al., 2012; Jeong et al., 2005; Krysta et al., 2006; Lushi et Stockie, 2010; Roussel et al., 2000; Sharan et al., 2012; Singh et al., 2013). Nous avons couplé notre méthode de résolution de ce problème avec d'autres approches d'optimisation ou/et de régularisation pour traiter les cas où le système est mal posé. Ces techniques sont des outils largement utilisés dans d'autres domaines d'application pour compenser les erreurs dues au manque de données ou à la forte sensibilité des problèmes aux paramètres d'entrées.

Le système de modélisation inverse (ReWind) développé dans cette étude a été couplé aux deux modèles opérationnels de dispersion atmosphérique SIRANE (Soulhac et al., 2012, 2011) et SIRANERISK (Cierco et Soulhac, 2009a; Lamaison et al., 2011a, 2011b) qui sont deux modèles de « réseaux des rues » fondés principalement sur le calcul de bilans de masse pour déterminer les concentrations de polluants à l'intérieur de la canopée urbaine. Après avoir validé ces deux modèles spécifiques dans la première partie, nous avons étudié la sensibilité de l'algorithme inverse via la

variation de plusieurs paramètres tels que la direction et la vitesse de vent, les positions des récepteurs, etc. en utilisant des observations synthétiques issues des modèles physiques. Ensuite, nous avons appliqué notre algorithme dans des conditions relativement proches des situations réelles en utilisant des observations expérimentales effectuées dans la soufflerie atmosphérique de l'École Centrale de Lyon.

Ce manuscrit est structuré en quatre parties principales dont chacune se partage en deux chapitres. Suite à cette introduction, on trouvera dans la 1<sup>ère</sup> partie de ce rapport quelques généralités concernant les principaux thèmes abordés dans cette étude. La 2<sup>ème</sup> partie sera consacrée à la modélisation directe de dispersion atmosphérique en milieu urbain. La 3<sup>ème</sup> partie décrit la philosophie générale du système de modélisation inverse développé ainsi que quelques résultats des études de sensibilité. La 4<sup>ème</sup> partie présentera deux applications typiques de notre algorithme inverse en milieux urbains. Cette dernière partie montre l'efficacité de cet algorithme à reproduire les caractéristiques de la source de pollution.

Dans le premier chapitre de la première partie, nous rappelons le principe de la mise en œuvre de la modélisation inverse dans la pratique et nous énumérons les divers outils indispensables pour son application. Nous citons au fur et à mesure certains travaux de recherches consacrés à la résolution des problèmes inverses dans plusieurs domaines d'ingénierie et en particulier l'étude de la dispersion atmosphérique. Le deuxième chapitre est consacré à la description de la démarche adoptée pour ce travail de recherche ainsi que les principales questions scientifiques abordées, afin d'obtenir des estimations correctes des caractéristiques de la source de pollution atmosphérique à l'échelle locale.

Dans la deuxième partie, nous présentons les deux modèles directs de dispersion atmosphérique SIRANE et SIRANERISK, qui ont pour spécificités de pouvoir traiter l'écoulement dans des milieux complexes en tenant compte des effets locaux de dispersion dus à la présence des obstacles. Dans le premier chapitre, nous présenterons la performance du modèle SIRANE après avoir discuté et évalué la fiabilité des paramétrages adoptés pour simuler les échanges verticaux entre la canopée et l'atmosphère sus-jacente, les transferts aux intersections de rues et la canalisation des écoulements à l'intérieur de la canopée. Dans le deuxième chapitre, nous présentons la spécificité du modèle SIRANERISK qu'il lui permet de traiter des rejets instationnaires en milieux urbains complexes. Ensuite, nous exposons une étude de validation de ce modèle en utilisant des mesures de concentrations effectuées dans la soufflerie atmosphérique sur des configurations académiques.

Dans la troisième partie, nous exposons au cours du premier chapitre une revue bibliographique non exhaustive des différentes méthodes utilisées pour résoudre un système de modélisation inverse de dispersion atmosphérique. Dans un deuxième chapitre, nous présentons la philosophie générale de l'algorithme inverse ReWind, développé dans le cadre de ces travaux. Nous effectuons par la suite une étude de sensibilité détaillée de cet outil inverse en utilisant des observations synthétiques afin d'en déterminer leurs limites d'application dans des situations réelles. La discussion des résultats de ReWind a été effectuée à travers les résultats d'autres travaux antérieurs ou en expliquant la phénoménologie de l'écoulement et de la dispersion atmosphérique.

La quatrième et dernière partie de ce manuscrit est consacrée à l'étude de la fiabilité et de la performance de notre système de modélisation inverse à reproduire les paramètres sources en utilisant des mesures expérimentales effectuées en soufflerie. Dans le premier chapitre, nous testons la fiabilité de ReWind à estimer l'émission instantanée d'une source de polluant atmosphérique dans une couche limite turbulente et dans un quartier idéalisé. Ensuite, nous avons présenté en détail une comparaison entre quatre méthodes différentes d'estimation des paramètres de régularisation afin d'appliquer correctement la méthode de Tikhonov pour reproduire les débits d'émission à l'échelle

locale en utilisant des signaux instantanés et des moyennes d'ensemble de la concentration. Dans le deuxième chapitre, nous présentons notre méta-algorithme qui a été développé pour identifier la position inconnue d'une source de pollution atmosphérique à l'échelle locale. Après la présentation de la philosophie générale de cette méthode de recherche itérative, nous discutons le choix du meilleur critère d'arrêt dans des situations pratiques pour ce type de problèmes. Ces critères sont testés sur des situations académiques fictives en utilisant l'algorithme inverse présenté dans le chapitre précédent et sur des mesures synthétiques fournies par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK. Après avoir étudié la sensibilité de cet algorithme à retrouver le débit et la position de la source aux emplacements des récepteurs, nous avons appliqué cette approche sur des situations complexes à l'échelle locale en utilisant des mesures de concentration en soufflerie et des observations synthétiques. Nous indiquons à l'issue de ce chapitre la faisabilité de notre système de modélisation inverse à reconstruire le terme source dans des situations proches des conditions réelles.

Enfin, nous achevons ce manuscrit par une conclusion générale, dans laquelle nous résumons les principaux résultats de ce travail et où nous proposons des perspectives et travaux de recherche à envisager à court et à long terme.

## Références

- Askan, A., Akcelik, V., Bielik, J., Ghattas, O., 2010. Parameter sensitivity analysis of a nonlinear least-squares optimization-based anelastic full waveform inversion method. *Comptes Rendus Mécanique* 338, 364–376.
- Backus, G.E., Gilbert, J.F., 1967. Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems. *Geophys. J. Int.* 13, 247–276.
- Bocquet, M., 2010. Modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique accidentelle : progrès récents. *Pollut. Atmos.*
- Bouscaren, R., 2010. Retour aux sources. La recherche et l'identification des sources de pollution. Pourquoi ? Comment ? *Pollut. Atmospherique* 9–11.
- Carruthers, D.J., Edmunds, H.A., Lester, A.E., McHugh, C.A., Singles, R.J., 2000. Use and Validation of ADMS-Urban in Contrasting Urban and Industrial Locations. *Int. J. Environment and Pollution* 14, 364–374.
- Chow, F.K., Kosović, B., Chan, S., 2008. Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 1553–1572.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., 2009. Validation expérimentale en soufflerie du code de dispersion SIRANERISK – Dispersion dans un quartier idéalisé. CEA-DAM, Bruyères le Châtel. 68p.
- Han, Y.-J., Holsen, T.M., Hopke, P.K., 2007. Estimation of source locations of total gaseous mercury measured in New York State using trajectory-based models. *Atmos. Environ.* 41, 6033–6047.
- Hertel, O., Berkowicz, R., 1989. Modelling pollution from traffic in a street canyon. Evaluation of data and model development. DMU Luft A-129, NERI.
- IARC, 2013. International Agency for research on Cancer, press release N°221.
- Ionescu, A., 2010. Retour aux sources de pollution atmosphérique: point de vue des scientifiques français. *Pollut. Atmospherique* 5.
- Issartel, J.-P., Sharan, M., Singh, S.K., 2012. Identification of a Point of Release by Use of Optimally Weighted Least Squares. *Pure Appl. Geophys.* 169, 467–482.
- Jeong, H.-J., Kim, E.-H., Suh, K.-S., Hwang, W.-T., Han, M.-H., Lee, H.-K., 2005. Determination of the source rate released into the environment from a nuclear power plant. *Radiat. Prot. Dosimetry* 113, 308–313.
- Kanasewich, E.R., Chiu, S.K., 1985. Least-squares inversion of spatial seismic refraction data. *Bull. Seismol. Soc. Am.* 75, 865–880.

- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment. *Atmos. Environ.* 41, 465–479.
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Armand, P., 2011a. Presentation of siranerisk-2.0 – A decision-support oriented computational tool adapted to the dispersion of deleterious rbc agent in the urban atmospheric environment – Examples of application.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Cierco, F.-X., Salizzoni, P., Armand, P., 2011b. Validation of siranerisk-2.0 operational model against a lagrangian particle dispersion model and a new campaign of dispersion experiments performed in the Imfa-ecl wind tunnel in an idealized urban mock up.
- Lewis, J.M., Derber, J.C., 1985. The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints. *Tellus A* 37, 309–322.
- Lewis, J.M., Lakshmvarahan, S., Dhall, S., 2006. *Dynamic Data Assimilation: A Least Squares Approach*. Cambridge University Press.
- Lines, L. r., Treitel, S., 1984. A Review of Least-Squares Inversion and Its Application to Geophysical Problems\*. *Geophys. Prospect.* 32, 159–186.
- Lushi, E., Stockie, J.M., 2010. An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources. *Atmos. Environ.* 44, 1097–1107.
- Mulholland, M., Seinfeld, J.H., 1995. Inverse air pollution modelling of urban-scale carbon monoxide emissions. *Atmos. Environ.* 29, 497–516.
- Richardson, R.M., Zandt, G., 2009. Inverse problems in geophysics. (No. GEOS 567). University of Arizona, Tuson, Arizona 85721.
- Robins, A.G., Apsley, D.D., 2000. Modelling of building effects in ADMS. ADMS Technical Specification, Paper P16/01N/00.
- Roussel, G., Delmaire, G., Ternisien, E., Lherbier, R., 2000. Separation problem of industrial particles emissions using a stationary scattering model. *Environ. Model. Softw.* 15, 653–661.
- Sacre, C., Chiron, M., Flori, J.-P., 1995. Development of an index of air-pollution from traffic using epidemiologic studies. *Sci. Total Environ.* 169, 63–69.
- Sharan, M., Singh, S.K., Issartel, J.-P., 2012. Least Square Data Assimilation for Identification of the Point Source Emissions. *Pure Appl. Geophys.* 169, 483–497.
- Singh, S.K., Sharan, M., Issartel, J.-P., 2013. Inverse Modelling for Identification of Multiple-Point Releases from Atmospheric Concentration Measurements. *Bound.-Layer Meteorol.* 146, 277–295.
- Soulhac, L., Perkins, R.J., Salizzoni, P., 2008. Flow in a street canyon for any external wind direction. *Bound.-Layer Meteorol.* 126, 365–388.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. *Atmos. Environ.* 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D., Rios, I., 2012. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part II, validation of the model on a real case study. *Atmos. Environ.* 49, 320–337.
- Wilson, J.D., Shum, W.K.N., 1992. A re-examination of the integrated horizontal flux method for estimating volatilisation from circular plots. *Agric. For. Meteorol.* 57, 281–295.
- Yee, E., Lien, F.-S., Keats, A., D'Amours, R., 2008. Bayesian inversion of concentration data: Source reconstruction in the adjoint representation of atmospheric diffusion. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 96, 1805–1816.



---

## **Première partie**

### **Généralités**

---



## **I.1. Principe et outils de la modélisation inverse**

---

*Ce chapitre est consacré à resituer notre travail par rapport à ceux réalisés antérieurement par d'autres chercheurs. Après avoir fourni une description du principe d'application de la modélisation inverse dans la pratique, nous énumérons les principaux outils indispensables à la mise en œuvre de la méthode inverse pour estimer les paramètres d'une source de pollution atmosphérique.*

---

### **I.1.1. Introduction**

Bien que l'utilisation de la théorie de l'estimation ait été introduite il y a deux siècles en astronomie pour étudier le mouvement de notre système solaire, ce domaine a été développé et n'a reçu une attention considérable qu'à partir des années soixante (« l'âge d'or » de la modélisation inverse (Mosegaard et Tarantola, 2002)) avec l'évolution rapide des ordinateurs et des moyens de calculs numériques (Cohn, 1997). La modélisation inverse a été considérée depuis toujours comme une méthode d'estimation, puisque l'objectif de son utilisation est de prédire les paramètres manquants d'un système physique ou mathématique. Une des premières définitions de la modélisation inverse est proposée par Keller (1976) qui considère « deux problèmes inverses l'un de l'autre, si la formulation de l'un implique tout ou une partie de la solution de l'autre ». Cette définition met en évidence le fait que les problèmes inverses et directs sont en relation conjointe les uns des autres. La modélisation directe permet de prédire les effets en connaissant les causes (par la modélisation de l'évolution temporelle des phénomènes physiques réels), alors que la modélisation inverse permet de remonter aux causes à partir de leurs effets. Par exemple, dans le domaine de la pollution atmosphérique, la modélisation directe consiste à prédire les concentrations en simulant l'évolution de la physique d'advection et de diffusion des polluants par des « modèles orientés vers la source » (Ionescu, 2010) tandis que la méthode inverse permet de caractériser les causes (terme source) à partir de leurs effets (les mesures de concentrations aux niveaux des récepteurs) en minimisant souvent l'écart entre les observations (concentrations de pollution) et les prévisions théoriques fournies par des modèles physiques (modèle de dispersion atmosphérique). Mis à part l'algorithme d'inversion, l'application de la méthode inverse nécessite à la fois des mesures de concentration et un modèle ou un dispositif intermédiaire qui décrit l'évolution des phénomènes physiques de transport et de dispersion des polluants.

### **I.1.2. Principe d'application de la modélisation inverse**

Le principe général de la modélisation inverse rend ses applications assez génériques et possibles dans plusieurs domaines d'activité, en particulier les sciences de l'ingénieur. En effet, les problèmes inverses ont été largement utilisés dans plusieurs domaines d'application tels que les sciences de la terre (par exemple l'estimation des paramètres d'entrée pour les modèles géophysiques), la météorologie (Aster et al., 2005; Menke, 1984; Mosegaard et Tarantola, 2002; Scales et al., 2001; Tarantola, 2005), l'imagerie (reconstruction et amélioration des images) (Arridge, 1999; Cai et al., 1996; Carfantan et Mohammad-Djafari, 1995; Halimi et al., 2011; Schweiger et al., 2003), l'acoustique (Hursky et al., 2004; Li et Li, 2013), l'hydraulique de surface et souterraine (Alapati et Kabala, 2000; Bagtzoglou et al., 1992; Giacobbo et al., 2002; Gorelick et al., 1983; Jha et

Datt, 2012; Ngnepieba et al., 2002), l'étude des océans (Bennett, 2002, 1992; Gregg, 2008; Wunsch, 1996) et bien sûr l'étude de l'atmosphère (Bennett, 2002; Daley, 1993; Kalnay, 2003; Sportisse et Quélo, 2003; Zheng et al., 2010).

Dans le cadre des applications destinées à la qualité de l'air, les méthodes inverses ont été utilisées sur une grande variété d'échelles spatiales (géographiques) dont les échelles globale et continentale (Gilliland et al., 2006; Delle Monache et al., 2008; Hirsch et al., 2006; Houweling et al., 1999; Issartel et Baverel, 2003; Mathieu et al., 2013; Müller et Stavrakou, 2005; Politis et Robertson, 2004; Robertson et Langner, 1998; Seibert et Frank, 2004; Stohl, 1996; Villani et al., 2010), l'échelle régionale (Chang et al., 1997, 1996; Mulholland et Seinfeld, 1995; Peylin et al., 2005; Pison, 2005; Thomson et al., 2007) et l'échelle locale (Chow et al., 2008; Flesch et al., 2005; Keats et al., 2007a; Lushi et Stockie, 2010; Senocak et al., 2008; Yee et al., 2008). Bien que les références citées ci-dessus ne représentent pas une liste exhaustive de l'ensemble des études réalisées, nous avons pu constater que peu d'applications envisagent l'échelle locale dans les milieux urbains et industriels complexes. En effet, parmi les études effectuées à l'échelle locale, la plupart d'entre elles sont consacrées à la reconstruction de sources de pollution dans les milieux agricoles (Flesch et al., 2005; Keats et al., 2007b; Wilson et Shum, 1992) et désertiques (Thomson et al., 2007).

Par ailleurs, la modélisation inverse a été mise en œuvre pour identifier les paramètres des sources de pollution dans les milieux intérieurs (Asaeda et Chen, 2007; Cai et al., 2012; Liu et al., 2012; Liu et Zhai, 2008, 2007; Sohn et al., 2002; Zhang et al., 2013; Zhang et Chen, 2007). Bien que l'inversion des sources de pollution en milieu intérieur ait retenu l'attention de la communauté scientifique pendant la dernière décennie, Zhang et al. (2013) et Zuo et Chen (2010) considèrent qu'actuellement il n'y a aucune méthode inverse capable de reproduire les émissions instantanées à l'intérieur des bâtiments sans utiliser des modèles de type CFD. Ces modèles ne peuvent malheureusement pas encore répondre aux exigences de gestion des situations de crises dans la mesure où ils nécessitent des temps de simulation beaucoup trop importants.

### **I.1.3. Outils de la modélisation inverse**

Puisque le principe de base de la modélisation inverse repose sur une utilisation conjointe d'un modèle direct et d'un algorithme d'inversion pour minimiser l'écart entre les observations et les mesures, nous pouvons déduire que la mise en œuvre de cette approche dans la pratique nécessite trois outils indispensables : des modèles de prévision, des mesures et un algorithme d'inversion.

#### **I.1.3.1. Modèles de prévision ou modèles physiques**

Les modèles de prévision physique reposent sur des relations qui assurent le lien entre les données mesurées et les paramètres à estimer. Il peut s'agir de modèles directs de dispersion atmosphérique, de modèles adjoints, ou de fonctions de probabilité (Ashbaugh et al., 1985; Liu et Zhai, 2007; Stohl, 1996) qui décrivent la variation des paramètres observés (concentration au niveau des récepteurs) en fonction de ceux à déterminer (le débit d'émission et/ou la position de la source). Les modèles de dispersion atmosphérique sont souvent les plus utilisés avec l'algorithme inverse. Il s'agit d'approches numériques qui mettent en œuvre des concepts théoriques différents (gaussien, lagrangien, eulérien,...) dont chaque catégorie se caractérise par leurs complexités et leurs limites d'applications. Plusieurs études de recherche ont fait l'objet de couplage d'algorithmes inverses avec des modèles de dispersion atmosphérique de type Gaussien (Allen et al., 2007; Hanna et al., 1990; Hogan et al., 2005; Islam, 1999; Khlaifi et al., 2009; Krysta et al., 2006; Lushi et Stockie, 2010; Quélo et al., 2005; Thomson et al., 2007), Lagrangien (Delle Monache et al., 2008; Wilson et Shum, 1992),

Eulérien à méso-échelle (Bocquet, 2007; Issartel et Baverel, 2003; Quélo et al., 2007; Robertson et Langner, 1998) ou Eulérien CFD (Bady, 2013; Chow et al., 2008; Liu et Zhai, 2007) pour estimer les paramètres des sources d'une pollution intérieure ou extérieure. D'autres études (Mathieu et al., 2013; Penenko et al., 2002) couplent deux modèles de prévision différents avec la même méthode inverse pour reconstruire une source accidentelle de pollution radioactive. Par exemple, Mathieu et al. (2013), ont couplé à la fois un modèle de transport Eulérien (Idx) et un modèle à bouffées Gaussien (pX) avec leur algorithme d'inversion pour avoir des prévisions de transport respectivement à grande échelle (échelle de Japon) et dans un rayon de 80km de la source (centrale nucléaire). Wotawa et al. (2003) ont utilisé cinq modèles de dispersion différents pour construire la matrice de transfert atmosphérique (de contribution des sources aux récepteurs) utilisée par la suite avec un algorithme inverse pour identifier les paramètres d'une source de pollution à l'échelle globale (continentale). Ces approches numériques jouent souvent un rôle assez important dans la modélisation inverse pour remonter aux paramètres sources. En effet, la fiabilité d'estimation du débit d'émission ou de la position de la source est parfaitement liée au choix et à la pertinence des modèles physiques de prévision (Hartley et Prinn, 1993; Politis et Robertson, 2004).

### **I.1.3.2. Observations**

Les mesures de concentration sont indispensables à la modélisation inverse, quelle que soit la méthode d'inversion utilisée. Ces observations peuvent être des mesures réelles des concentrations fournies par un dispositif de mesure de qualité de l'air (Khlaifi et al., 2009) ou des données issues des simulations numériques ou expérimentales. Les données synthétiques sont construites à partir des simulations numériques par un modèle de dispersion atmosphérique. Elles sont utilisées généralement pour étudier la sensibilité de l'algorithme inverse aux variables d'entrées. En effet, l'utilisation d'observations synthétiques dans l'inversion permet de ne prendre en compte que les incertitudes relatives aux erreurs de la méthode inverse, le modèle de prévision physique étant alors considéré comme parfait (Allen et al., 2007b; Cervone et Franzese, 2010; Haupt, 2005; Robertson et Persson, 1993). Les mesures expérimentales de concentration peuvent être réalisées dans les grandes souffleries atmosphériques (Krysta et al., 2006; Rudd et al., 2012) ou dans le cadre d'expériences in-situ à petite (Chow et al., 2008; Keats et al., 2007a; Yee et al., 2008) ou à grande échelles (Robertson et Langner, 1998; Yee et al., 2008). Généralement, l'inversion avec ces données fait l'objet d'études où l'objectif est de comparer la fiabilité des méthodes inverses face à des situations de rejets proches de la réalité, en gardant le contrôle sur plusieurs paramètres d'entrée.

Les résultats de la modélisation inverse sont fortement sensibles à la qualité et à la disponibilité des données d'observation (Huang et Vedel, 2003; Lehning et al., 1994). Même l'utilisation d'observations effectuées dans des campagnes de mesures de références bien documentées, comme ETEX (Nodop et al., 1998), peut poser des problèmes dans l'application de la modélisation inverse. Par exemple, Bocquet (2007a; 2007b) a montré que sa méthode inverse n'a pas réussi à remonter aux paramètres de la source avant les 15 premières heures, étant donné la non disponibilité des données nécessaires pour son bon fonctionnement.

L'application limitée de la modélisation inverse dans des environnements complexes peut donc également s'expliquer en grande partie par le manque de données d'observations. En effet, les mesures individuelles de concentration dans des milieux industriels et urbains à forte densité d'obstacles ne permettent pas d'avoir des résultats fiables sur le terme source sauf en utilisant des techniques inverses sophistiquées capables de compenser l'erreur provoquée par le manque de données d'observation (Peylin et al., 2005). Par exemple, la mise en œuvre d'une méthode de

régularisation peut imposer une contrainte supplémentaire sur la solution pour limiter sa sensibilité aux données bruitées ou individuelles fournies par le dispositif de mesures disponible.

### **I.1.3.3. Algorithme d'inversion**

Historiquement d'après Bouscaren (2010) et Rao (2007), les premières applications de la modélisation inverse reposaient principalement sur les méthodes de rétro-trajectoire. Dans ce cas, l'idée est d'utiliser des relations purement statistiques (Ashbaugh, 1983; Ashbaugh et al., 1985; Stohl, 1998, 1996) ou des modèles de dispersion atmosphérique de type Lagrangien (Flesch et al., 2005, 2004, 1995; Han et al., 2005; Loh et al., 2008; McGinn et al., 2007; Seibert et Frank, 2004; Wang et al., 2013), Gaussien (Price et al., 2004) ou Eulérien (Hourdin et Talagrand, 2006; Hourdin et al., 2006, 1999; Issartel et Baverel, 2002) d'une manière inverse (du point de vue temporel). Néanmoins, d'autres algorithmes d'inversion ont été adoptés dans les deux dernières décennies, pour identifier les paramètres d'une source de pollution atmosphérique tels que le filtre de Kalman (Drews et al., 2005, 2004; Jorquera et Castro, 2010; Mulholland et Seinfeld, 1995), l'algorithme génétique (Allen et al., 2007a, 2007b; Haupt et al., 2013; Khlaifi et al., 2009), la méthode de recuit simulé (Thomson et al., 2007), le modèle adjoint de transport (Houweling et al., 1999; Liu et Zhai, 2007; Müller et Stavrou, 2005; Pudykiewicz, 1998; Quélo et al., 2005; Skiba, 2003; Vautard et al., 2000), le maximum d'entropie (Bocquet, 2007a, 2005a, 2005b; Krysta et al., 2008) et le maximum de vraisemblance (Koochkan, 2012; Winiarek et al., 2012). La plupart de ces algorithmes sont fondés sur des méthodes bayésiennes (Delle Monache et al., 2008; Enting, 2002; Goyal et al., 2005; Keats et al., 2007a; Senocak et al., 2008; Sohn et al., 2002). Nous présentons dans le premier chapitre de la troisième partie les principales techniques et approches d'inversion utilisées dans le domaine de la dispersion atmosphérique.

Le problème inverse formulé dans le cadre de notre étude est du même type que la méthode variationnelle 4D-Var d'assimilation de données dont l'objectif est de réduire l'écart entre les observations et les résultats théoriques des modèles de dispersion atmosphérique SIRANE/SIRANERISK (Talagrand, 1997). Pour la recherche du débit d'une source supposée connue, nous utilisons l'hypothèse de linéarité entre les émissions et les concentrations, effectuée dans la plupart des modèles de dispersion qui négligent la cinétique chimiques des polluants. Cette méthode non paramétrique nécessite la mise en œuvre d'approches numériques itératives uniquement lorsque les dimensions du système sont assez importantes (Bocquet, 2010). Cependant, vu que les méthodes variationnelles sont assez lourdes à mettre en œuvre (calcul de l'adjoint, calcul de gradient, ...), nous avons développé un préprocesseur de traitement du problème inverse qui choisit automatiquement la meilleure méthode de résolution suivant sa nature (sous-déterminé, surdéterminé, voir chapitre 3 de la partie III). D'autre part, nous avons utilisé une méthode de régularisation quadratique de type Tikhonov (Tikhonov et Arsenin, 1977) pour résoudre le problème de bruitage des signaux d'observation. Ce choix a été justifié par la fiabilité et la simplicité de cette méthode qui a été testée dans plusieurs études antérieures. Cette régularisation nous permet aussi d'avoir des résultats d'inversion plus fiables sur des mesures en soufflerie de rejet de courte durée. La mise en œuvre de cette méthode dans nos travaux a été effectuée de la même manière que celle de Kathirgamanathan et al. (2003) qui l'ont utilisée pour stabiliser un problème inverse de type moindres carrés. Ces chercheurs ont présenté l'utilité d'un terme de régularisation de Tikhonov ajouté dans l'équation pour inverser des débits instationnaires des sources de pollution. Nous présentons en détail cette méthode dans la section (III.2.2.3.4). Pour la recherche de la position de la

source et de son débit simultanément, nous avons utilisé un méta-algorithme itératif avec une nouvelle fonction coût (voir chapitre 2 de la partie IV)

#### I.1.4. Références

- Alapati, S., Kabala, Z.J., 2000. Recovering the release history of a groundwater contaminant using a non-linear least-squares method. *Hydrol. Process.* 14, 1003–1016.
- Alice B. Gilliland, K.W.A., 2006. Seasonal NH<sub>3</sub> emissions for the continental united states: Inverse model estimation and evaluation. *Atmos. Environ.* 4986–4998.
- Allen, C.T., Haupt, S.E., Young, G.S., 2007a. Source Characterization with a Genetic Algorithm–Coupled Dispersion–Backward Model Incorporating SCIPUFF. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 46, 273–287.
- Allen, C.T., Young, G.S., Haupt, S.E., 2007b. Improving pollutant source characterization by better estimating wind direction with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 41, 2283–2289.
- Arridge, S.R., 1999. Optical tomography in medical imaging. *Inverse Probl.* 15, R41–R93.
- Asaeda, T., Chen, Q., 2007. Identification of contaminant sources in enclosed spaces by a single sensor. *Indoor Air* 17, 439–449.
- Ashbaugh, L.L., 1983. A Statistical Trajectory Technique for Determining Air Pollution Source Regions. *J. Air Pollut. Control Assoc.* 33, 1096–1098.
- Ashbaugh, L.L., Malm, W.C., Sadeh, W.Z., 1985. A residence time probability analysis of sulfur concentrations at grand Canyon National Park. *Atmospheric Environ.* 19, 1263–1270.
- Aster, R.C., Thurber, C.H., Borchers, B., 2005. *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Academic Press.
- Bady, M., 2013. Fundamentals of Direct Inverse CFD Modeling to Detect Air Pollution Sources in Urban Areas. *Comput. Water Energy Environ. Eng.* 02, 31–42.
- Bagtzoglou, A.C., Dougherty, D.E., Tompson, A.F.B., 1992. Application of particle methods to reliable identification of groundwater pollution sources. *Water Resour. Manag.* 6, 15–23.
- Bennett, A.F., 1992. *Inverse Methods in Physical Oceanography*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Bennett, A.F., 2002. *Inverse modeling of the ocean and atmosphere*. Cambridge University Press, Cambridge, UK; New York.
- Bocquet, M., 2005a. Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. I: Theory. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131, 2191–2208.
- Bocquet, M., 2005b. Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. II: Applications. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131, 2209–2223.
- Bocquet, M., 2007a. High-resolution reconstruction of a tracer dispersion event: application to ETEX. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 133, 1013–1026.
- Bocquet, M., 2007b. Modélisation inverse et assimilation de données non-gaussiennes pour les traceurs atmosphériques : Application à ETEX, Algesiras et Tchernobyl. *Habilitation à Diriger des Recherches*.
- Bocquet, M., 2010. Modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique accidentelle : progrès récents. *Pollut. Atmos.*
- Bouscaren, R., 2010. Retour aux sources. La recherche et l'identification des sources de pollution. Pourquoi ? Comment ? *Pollut. Atmosphérique* 9–11.
- Cai, H., Li, X., Kong, L., Ma, X., Shao, X., 2012. Rapid identification of single constant contaminant source by considering characteristics of real sensors. *J. Cent. South Univ.* 19, 593–599.
- Cai, W., Das, B.B., Liu, F., Zavallos, M., Lax, M., Alfano, R.R., 1996. Time-resolved optical diffusion tomographic image reconstruction in highly scattering turbid media. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 93, 13561–13564.
- Carfantan, H., Mohammad-Djafari, A., 1995. Approche bayésienne et algorithme multirésolution pour un probleme inverse non linéaire en tomographie de diffraction. Presented at the Quinzième colloque Gretsi, Juan-Les-Pins, p. 4.

- Cervone, G., Franzese, P., 2010. Monte Carlo source detection of atmospheric emissions and error functions analysis. *Comput. Geosci.* 36, 902–909.
- Chang, M.E., Hartley, D.E., Cardelino, C., Chang, W.-L., 1996. Inverse modeling of biogenic isoprene emissions. *Geophys. Res. Lett.* 23, 3007–3010.
- Chang, M.E., Hartley, D.E., Cardelino, C., Haas-Laursen, D., Chang, W.-L., 1997. On using inverse methods for resolving emissions with large spatial inhomogeneities. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 102, 16023–16036.
- Chow, F.K., Kosović, B., Chan, S., 2008. Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 1553–1572.
- Cohn, S.E., 1997. An introduction to estimation theory. *J.-Meteorol. Soc. Jpn. Ser. 2* 75, 147–178.
- Daley, R., 1993. *Atmospheric Data Analysis*. Cambridge University Press.
- Delle Monache, L., Lundquist, J.K., Kosović, B., Johannesson, G., Dyer, K.M., Aines, R.D., Chow, F.K., Belles, R.D., Hanley, W.G., Larsen, S.C., Loosmore, G.A., Nitao, J.J., Sugiyama, G.A., Vogt, P.J., 2008. Bayesian Inference and Markov Chain Monte Carlo Sampling to Reconstruct a Contaminant Source on a Continental Scale. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 2600–2613.
- Drews, M., Lauritzen, B., Madsen, H., 2005. Analysis of a Kalman Filter Based Method for on-Line Estimation of Atmospheric Dispersion Parameters Using Radiation Monitoring Data. *Radiat. Prot. Dosimetry* 113, 75–89.
- Drews, M., Lauritzen, B., Madsen, H., Smith, J.Q., 2004. Kalman filtration of radiation monitoring data from atmospheric dispersion of radioactive materials. *Radiat. Prot. Dosimetry* 111, 257–269.
- Elbern, H., Schmidt, H., Ebel, A., 1997. Variational data assimilation for tropospheric chemistry modeling. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 102, 15967–15985. doi:10.1029/97JD01213
- Elbern, H., Schmidt, H., Talagrand, O., Ebel, A., 2000. 4D-variational data assimilation with an adjoint air quality model for emission analysis. *Environ. Model. Softw.* 15, 539–548.
- Enting, I.G., 2002. *Inverse problems in atmospheric constituent transport*. Cambridge University Press, Cambridge; New York.
- Flesch, T.K., Wilson, J.D., Harper, L.A., Crenna, B.P., 2005. Estimating gas emissions from a farm with an inverse-dispersion technique. *Atmos. Environ.* 39, 4863–4874.
- Flesch, T.K., Wilson, J.D., Harper, L.A., Crenna, B.P., Sharpe, R.R., 2004. Deducing Ground-to-Air Emissions from Observed Trace Gas Concentrations: A Field Trial. *J. Appl. Meteorol.* 43, 487–502.
- Flesch, T.K., Wilson, J.D., Yee, E., 1995. Backward-Time Lagrangian Stochastic Dispersion Models and Their Application to Estimate Gaseous Emissions. *J. Appl. Meteorol.* 34, 1320–1332.
- Giacobbo, F., Marseguerra, M., Zio, E., 2002. Solving the inverse problem of parameter estimation by genetic algorithms: the case of a groundwater contaminant transport model. *Ann. Nucl. Energy* 29, 967–981.
- Gorelick, S.M., Evans, B., Remson, I., 1983. Identifying sources of groundwater pollution: An optimization approach. *Water Resour. Res.* 19, 779–790. doi:10.1029/WR019i003p00779
- Goyal, A., Small, M.J., von Stackelberg, K., Burmistrov, D., Jones, N., 2005. Estimation of Fugitive Lead Emission Rates from Secondary Lead Facilities using Hierarchical Bayesian Models. *Environ. Sci. Technol.* 39, 4929–4937.
- Gregg, W.W., 2008. Assimilation of SeaWiFS ocean chlorophyll data into a three-dimensional global ocean model. *J. Mar. Syst.* 69, 205–225.
- Halimi, A., Altmann, Y., Dobigeon, N., Tourneret, J., 2011. Nonlinear unmixing of hyperspectral images using a generalized bilinear model. *Geosci. Remote Sens. IEEE Trans. On* 49, 4153–4162.
- Hanna, S.R., Chang, J.S., Strimaitis, D.G., 1990. Uncertainties in source emission rate estimates using dispersion models. *Atmospheric Environ. Part Gen. Top.* 24, 2971–2980.
- Han, Y.-J., Holsen, T.M., Hopke, P.K., Yi, S.-M., 2005. Comparison between back-trajectory based modeling and Lagrangian backward dispersion modeling for locating sources of reactive gaseous mercury. *Environ. Sci. Technol.* 39, 1715–1723.

- Hartley, D., Prinn, R., 1993. Feasibility of determining surface emissions of trace gases using an inverse method in a three-dimensional chemical transport model. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 98, 5183–5197.
- Haupt, S.E., 2005. A demonstration of coupled receptor/dispersion modeling with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 39, 7181–7189.
- Haupt, S.E., Annunzio, A.J., Schmehl, K.J., 2013. Evolving Turbulence Realizations of Atmospheric Flow. *Bound.-Layer Meteorol.* 149, 197–217.
- Hirsch, A.I., Michalak, A.M., Bruhwiler, L.M., Peters, W., Dlugokencky, E.J., Tans, P.P., 2006. Inverse modeling estimates of the global nitrous oxide surface flux from 1998–2001. *Glob. Biogeochem. Cycles* 20, n/a–n/a.
- Hogan, W.R., Cooper, G.F., Wagner, M.M., Wallstrom, G.L., 2005. An inverted gaussian plume model for estimating the location and amount of release of airborne agents from downwind atmospheric concentrations. Pittsburgh PA RODS Lab. Tech. Rep.
- Hourdin, F., Issartel, J.-P., Cabrit, B., Idelkadi, A., 1999. Reciprocity of atmospheric transport of trace species. *Comptes Rendus Académie Sci. - Ser. IIA - Earth Planet. Sci.* 329, 623–628.
- Hourdin, F., Talagrand, O., 2006. Eulerian backtracking of atmospheric tracers. I: Adjoint derivation and parametrization of subgrid-scale transport. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 132, 567–583.
- Hourdin, F., Talagrand, O., Idelkadi, A., 2006. Eulerian backtracking of atmospheric tracers. II: Numerical aspects. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 132, 585–603.
- Houweling, S., Kaminski, T., Dentener, F., Lelieveld, J., Heimann, M., 1999. Inverse modeling of methane sources and sinks using the adjoint of a global transport model. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 104, 26137–26160.
- Huang, X.-Y., Vedel, H., 2003. An introduction to data assimilation, in: SAF Training Workshop: 2nd GRAS SAF User Workshop, EUMETSAT, Darmstadt, Germany. pp. 25–37.
- Hursky, P., Porter, M.B., Cornuelle, B.D., Hodgkiss, W.S., Kuperman, W.A., 2004. Adjoint modeling for acoustic inversion. *J. Acoust. Soc. Am.* 115, 607.
- Ionescu, A., 2010. Retour aux sources de pollution atmosphérique: point de vue des scientifiques français. *Pollut. Atmosphérique* 5.
- Islam, M.A., 1999. Application of a Gaussian Plume Model to Determine the Location of an Unknown Emission Source. *Water. Air. Soil Pollut.* 112, 241–245.
- Issartel, J.-P., Baverel, J., 2002. Adjoint backtracking for the verification of the Comprehensive Test Ban Treaty. *Atmospheric Chem. Phys. Discuss.* 2, 2133–2150.
- Issartel, J.-P., Baverel, J., 2003. Inverse transport for the verification of the Comprehensive Nuclear Test Ban Treaty. *Atmospheric Chem. Phys.* 3, 475–486.
- Jha, M., Datt, B., 2012. Application of Simulated Annealing in Water Resources Management: Optimal Solution of Groundwater Contamination Source Characterization Problem and Monitoring Network Design Problems, Simulated Annealing - Single and Multiple Objective Problems, ISBN: 978-953-51-0767-5, InTech, in: Tsuzuki, M.S.G. (Ed.), Simulated Annealing - Single and Multiple Objective Problems. InTech.
- Jorquera, H., Castro, J., 2010. Analysis of urban pollution episodes by inverse modeling. *Atmos. Environ.* 44, 42–54.
- Kalnay, E., 2003. Atmospheric modeling, data assimilation, and predictability. Cambridge university press.
- Kathirgamanathan, P., Mckibbin, R., Mclachlan, R.I., 2003. Source release rate estimation of atmospheric pollution from a non-steady point source – Part 2: Source at an unknown location. *Res Lett Inf Math Sci* Vol.5, 85–118.
- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007a. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment. *Atmos. Environ.* 41, 465–479.
- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007b. Efficiently characterizing the origin and decay rate of a nonconservative scalar using probability theory. *Ecol. Model.* 205, 437–452.
- Keller, J.B., 1976. Inverse Problems. *Am. Math. Mon.*, Mathematical Association of America 83, 107–118.

- Khlaifi, A., Ionescu, A., Candau, Y., 2009. Pollution source identification using a coupled diffusion model with a genetic algorithm. *Math. Comput. Simul.* 79, 3500–3510.
- Koohkan, M.R., 2012. Multiscale data assimilation approaches and error characterisation applied to the inverse modelling of atmospheric constituent emission fields. Université Paris-Est.
- Krysta, M., Bocquet, M., Brandt, J., 2008. Probing ETEX-II data set with inverse modelling. *Atmospheric Chem. Phys.* 8, 3963–3971.
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Lehning, M., Shonnard, D.R., Chang, D.P., Bell, R.L., 1994. An inversion algorithm for determining area-source emissions from downwind concentration measurements. *Air Waste J. Air Waste Manag. Assoc.* 44, 1204–1213.
- Li, L., Li, J., 2013. An Inverse Modeling Method for Acoustic Emission Source of Cracking. *Appl. Mech. Mater.* 333-335, 1742–1745.
- Liu, D., Zhao, F.-Y., Wang, H.-Q., 2012. History recovery and source identification of multiple gaseous contaminants releasing with thermal effects in an indoor environment. *Int. J. Heat Mass Transf.* 55, 422–435.
- Liu, X., Zhai, Z., 2007. Inverse modeling methods for indoor airborne pollutant tracking: literature review and fundamentals: Indoor airborne pollutant tracking. *Indoor Air* 17, 419–438.
- Liu, X., Zhai, Z., 2008. Location identification for indoor instantaneous point contaminant source by probability-based inverse Computational Fluid Dynamics modeling. *Indoor Air* 18, 2–11.
- Loh, Z., Chen, D., Bai, M., Naylor, T., Griffith, D., Hill, J., Denmead, T., McGinn, S., Edis, R., 2008. Measurement of greenhouse gas emissions from Australian feedlot beef production using open-path spectroscopy and atmospheric dispersion modelling. *Aust. J. Exp. Agric.* 48, 244–247.
- Lushi, E., Stockie, J.M., 2010. An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources. *Atmos. Environ.* 44, 1097–1107.
- Mathieu, A., Korsakissok, I., Quélo, D., Saunier, O., Groëll, J., Didier, D., Corbin, D., Denis, J., Tombette, M., Winiarek, V., Bocquet, M., Quentric, E., Benoit, J.-P., 2013. État de la modélisation pour simuler l'accident nucléaire de la centrale Fukushima Daiichi. *Pollut. Atmosphérique* 2
- McGinn, S.M., Flesch, T.K., Crenna, B.P., Beauchemin, K.A., Coates, T., 2007. Quantifying ammonia emissions from a cattle feedlot using a dispersion model. *J. Environ. Qual.* 36, 1585–1590.
- Menke, W., 1984. *Geophysical Data Analysis : Discrete Inverse Theory.* Academic Press. 260pp.
- Mosegaard, K., Tarantola, A., 2002. Probabilistic approach to inverse problems, in: *International Handbook of Earthquake & Engineering Seismology, Part A.* Academic Press, pp. 237–265.
- Mulholland, M., Seinfeld, J.H., 1995. Inverse air pollution modelling of urban-scale carbon monoxide emissions. *Atmos. Environ.* 29, 497–516.
- Müller, J.-F., Stavrakou, T., 2005. Inversion of CO and NO<sub>x</sub> emissions using the adjoint of the IMAGES model. *Atmospheric Chem. Phys.* 5, 1157–1186.
- Ngnepieba, P., Le Dimet, F.X., Boukong, A., Nguetseng, G., 2002. Identification de paramètres: une application à l'équation de Richards. *ARIMA* 1, 127–157.
- Nodop, K., Connolly, R., Girardi, F., 1998. The field campaigns of the European Tracer Experiment (ETEX): overview and results. *Atmos. Environ.* 32, 4095–4108.
- Penenko, V., Baklanov, A., Tsvetova, E., 2002. Methods of sensitivity theory and inverse modeling for estimation of source parameters. *Future Gener. Comput. Syst.* 18, 661–671.
- Peylin, P., Rayner, P.J., Bousquet, P., Carouge, C., Hourdin, F., Heinrich, P., Ciais, P., 2005. Daily CO<sub>2</sub> flux estimates over Europe from continuous atmospheric measurements: 1, inverse methodology. *Atmospheric Chem. Phys.* 5, 3173–3186.
- Pison, I., 2005. Modélisation inverse pour l'optimisation des sources primaires de pollution atmosphérique à l'échelle régionale. Université Paris XII Val de Marne.
- Politis, K., Robertson, L., 2004. Bayesian updating of atmospheric dispersion after a nuclear accident. *J. R. Stat. Soc. Ser. C Appl. Stat.* 53, 583–600.

- Price, J.E., Lacey, R.E., Cole, N.A., Todd, R., Shaw, B.W., Capareda, S.C., Parnell, C.B.J., 2004. A Comparison of Ammonia Emission Rates from an Agricultural Area Source Using Dispersion Modeling: Gaussian versus Backward-Lagrangian Stochastic. Paper presented at the 2004 ASAE/CSAE Annual International Meeting held from August 1-4, 2004 at Ottawa, Ontario, Canada. Paper No. 044199.
- Pudykiewicz, J.A., 1998. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters. *Atmos. Environ.* 32, 3039–3050.
- Quélo, D., Krysta, M., Bocquet, M., Isnard, O., Minier, Y., Sportisse, B., 2007. Validation of the Polyphemus platform on the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases. *Atmos. Environ.* 41, 5300–5315.
- Quélo, D., Sportisse, B., Isnard, O., 2005. Data assimilation for short range atmospheric dispersion of radionuclides: a case study of second-order sensitivity. *J. Environ. Radioact.* 84, 393–408.
- Rao, K.S., 2007. Source estimation methods for atmospheric dispersion. *Atmos. Environ.* 41, 6964–6973.
- Robertson, L., Langner, J., 1998. Source function estimate by means of variational data assimilation applied to the ETEX-I tracer experiment. *Atmos. Environ.* 32, 4219–4225.
- Robertson, L., Persson, C., 1993. Attempts to Apply Four Dimensional Data Assimilation of Radiological Data Using the Adjoint Technique. *Radiat. Prot. Dosimetry* 50, 333–337.
- Rudd, A.C., Robins, A.G., Lepley, J.J., Belcher, S.E., 2012. An Inverse Method for Determining Source Characteristics for Emergency Response Applications. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 1–20.
- Scales, J.A., Smith, M.L., Treitel, S., 2001. *Introductory Geophysical Inverse Theory*. Samizdat Press.
- Schweiger, M., Gibson, A., Arridge, S.R., 2003. Computational aspects of diffuse optical tomography. *Comput. Sci. Eng.* 5, 33–41.
- Seibert, P., Frank, A., 2004. Source-receptor matrix calculation with a Lagrangian particle dispersion model in backward mode. *Atmos Chem Phys* 4, 51–63.
- Senocak, I., Hengartner, N.W., Short, M.B., Daniel, W.B., 2008. Stochastic event reconstruction of atmospheric contaminant dispersion using Bayesian inference. *Atmos. Environ.* 42, 7718–7727.
- Skiba, Y.N., 2003. On a method of detecting the industrial plants which violate prescribed emission rates. *Ecol. Model.* 159, 125–132.
- Sohn, M.D., Reynolds, P., Singh, N., Gadgil, A.J., 2002. Rapidly Locating and Characterizing Pollutant Releases in Buildings. *J. Air Waste Manag. Assoc.* 52, 1422–1432.
- Sportisse, B., Quélo, D., 2003. Data assimilation and inverse modeling of atmospheric chemistry. *Proc Indian Natl. Sci. Acad. Part Phys. Sci.* 69.
- Stohl, A., 1996. Trajectory statistics-A new method to establish source-receptor relationships of air pollutants and its application to the transport of particulate sulfate in Europe. *Atmos. Environ.* 30, 579–587.
- Stohl, A., 1998. Computation, accuracy and applications of trajectories—A review and bibliography. *Atmos. Environ.* 32, 947–966.
- Talagrand, O., 1997. Assimilation of observations, an introduction. *J. Meteorol. Soc. Jpn.* 75, 191–209.
- Tarantola, A., 2005. *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA.
- Thomson, L.C., Hirst, B., Gibson, G., Gillespie, S., Jonathan, P., Skeldon, K.D., Padgett, M.J., 2007. An improved algorithm for locating a gas source using inverse methods. *Atmos. Environ.* 41, 1128–1134.
- Tikhonov, A.N., Arsenin, V.Y., 1977. *Solutions of Ill-posed Problems.*, Translation Edition. ed. Halsted Press Book, Washington, DC.
- Vautard, R., Beekmann, M., Menut, L., 2000. Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling. *Environ. Model. Softw.* 15, 703–709.
- Villani, M.G., Bergamaschi, P., Krol, M., Meirink, J.F., Dentener, F., 2010. Inverse modeling of European CH<sub>4</sub> emissions: Sensitivity to the observational network. *Atmospheric Chem. Phys.* 10, 1249–1267.

- 
- Wang, W., Liu, W., Zhang, T., Ren, M., 2013. Evaluation of backward Lagrangian stochastic (bLS) model to estimate gas emissions from complex sources based on numerical simulations. *Atmos. Environ.* 67, 211–218.
- Wilson, J.D., Shum, W.K.N., 1992. A re-examination of the integrated horizontal flux method for estimating volatilisation from circular plots. *Agric. For. Meteorol.* 57, 281–295.
- Winiarek, V., Bocquet, M., Saunier, O., Mathieu, A., 2012. Estimation of errors in the inverse modeling of accidental release of atmospheric pollutant: Application to the reconstruction of the cesium-137 and iodine-131 source terms from the Fukushima Daiichi power plant. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 117, n/a–n/a.
- Wotawa, G., De Geer, L.-E., Denier, P., Kalinowski, M., Toivonen, H., D'Amours, R., Desiato, F., Issartel, J.-P., Langer, M., Seibert, P., Frank, A., Sloan, C., Yamazawa, H., 2003. Atmospheric transport modelling in support of CTBT verification—overview and basic concepts. *Atmos. Environ.* 37, 2529–2537.
- Wunsch, C., 1996. *The ocean circulation inverse problem*. Cambridge University Press, Cambridge; New York.
- Yee, E., Lien, F.-S., Keats, A., D'Amours, R., 2008. Bayesian inversion of concentration data: Source reconstruction in the adjoint representation of atmospheric diffusion. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 96, 1805–1816.
- Zhang, T.F., Chen, Q., 2007. Identification of contaminant sources in enclosed environments by inverse CFD modeling. *Indoor Air* 17, 167–177.
- Zhang, T. (Tim), Yin, S., Wang, S., 2013. An inverse method based on CFD to quantify the temporal release rate of a continuously released pollutant source. *Atmos. Environ.* 77, 62–77.
- Zheng, D.Q., Leung, J.K.C., Lee, B.Y., 2010. An ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation: Application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 44, 1699–1705.
- Zuo, W., Chen, Q., 2010. Fast and informative flow simulation in a building by using fast fluid dynamics model on graphics processing unit. *Build. Environ.* 45, 747–757.

## I.2. Présentation générale de l'étude

---

*L'objectif de ce travail était de construire une plate-forme de modélisation inverse opérationnelle et spécifique pour les milieux complexes tels que les zones urbaines et industrielles à forte densité d'obstacles. Dans ce chapitre, nous exposons les enjeux scientifiques de ce travail ainsi que la démarche adoptée pour répondre aux principales questions abordées.*

---

### I.2.1. Problématique : application de la modélisation inverse aux milieux complexe

Bien que la mise en œuvre de la modélisation inverse de la dispersion atmosphérique vise principalement l'amélioration des résultats des modèles directs de dispersion pour étudier la qualité de l'air en fournissant d'autres informations sur les émissions de pollution, elle peut être aussi considérée comme un outil pratique de prise de décision pour gérer les situations de crise. Dans ces situations, les enjeux scientifiques et les types de problèmes sont souvent assez différents suivant les besoins et les applications.

La caractérisation des paramètres de la source en dehors des situations de crise a été vue ainsi comme un enjeu primordial pour assurer le respect des réglementations sur la limitation des débits de polluants dans l'atmosphère. En effet, une bonne connaissance du terme source permet de mieux évaluer les niveaux de concentration auxquels sont exposés les riverains dans l'environnement ou les travailleurs sur les sites industriels en utilisant les modèles directs de dispersion atmosphérique. De même, la mise en place de la modélisation inverse sur les sites industriels permet de bien maîtriser les fuites dans les infrastructures complexes et d'éviter des catastrophes environnementales et humaines comme :

- La catastrophe de Seveso (Italie) de 1976 relative à une fuite de dioxine très toxique échappée d'un réacteur de l'usine et détectée seulement 4 jours après l'émission. Cet accident a été classé comme la plus grande catastrophe depuis Hiroshima parce qu'il a affecté la santé de 26000 personnes et quelques dizaines de milliers d'animaux.
- L'explosion d'une sphère de stockage de la raffinerie de San Juan Ixhuatepec (Mexique) en 1984, déclenchée suite à une fuite dans la canalisation de GPL et qui a fait 500 morts, sans compter le nuage nocif dispersé dans l'atmosphère.
- La catastrophe de Bhopal (Inde) de 1984 qui a tué officiellement plus que 3500 personnes pendant la première nuit et plus de 20000 personnes sur les vingt ans qui ont suivi. Cet accident était dû à une fuite non maîtrisée de 40 tonnes de gaz toxiques d'isocyanate de méthyle de l'usine de pesticides d'Union Carbide.
- L'explosion de Piper-Alpha (mer du Nord) de 1988 qui a fait 167 morts et qui a été produite suite à une fuite de gaz sur la plate-forme pétrolière.
- L'incendie d'Amuay (Venezuela) en 2012 qui a provoqué la mort de 48 personnes et qui a été déclenché suite à une explosion causée par une fuite de gaz dans la raffinerie.
- L'explosion dans le port de Qingdao (Chine) dernièrement en 2013 qui a fait 47 morts.

De même, après les divers attentats terroristes (Londres et Madrid respectivement en 2005 et 2004, le World Trade Center du 11 Septembre 2001 à New-York) et les accidents industriels et nucléaires (Fukushima (Japon) en 2011, AZF en 2001 à Toulouse (France), Algésiras (Espagne) en 1998, Tchernobyl (Ukraine) en 1986 et l'accident de Loir-et-Cher (France) en 1980) qui se sont succédés au cours des dernières décennies et qui mettent en danger la santé et la vie des riverains, l'identification d'une source d'émission d'un polluant (en particulier d'un contaminant) dans les milieux urbains et industriels devient de plus en plus un sujet de recherche intensif. Bien évidemment, la connaissance rapide de la quantité des polluants rejetée et de la position de la source permettrait de réduire significativement les menaces en aidant les autorités à prendre des mesures de sécurité adaptées et à mieux gérer les risques.

Malgré la diversité et l'importance des enjeux face à ces aléas dans les milieux urbains et industriels à l'échelle locale, nous ne trouvons dans la littérature qu'un nombre très limité d'études (Brereton et Johnson, 2012; Keats et al., 2007a) traitant ce type de problèmes à des échelles où la géométrie des milieux est assez complexe. De plus, les études existantes couplent souvent des algorithmes inverses avec des modèles de dispersion directs non opérationnels (très coûteux) (Bady, 2013; Chow et al., 2008; Lien et al., 2006) ou non spécifiques à traiter la complexité de l'écoulement et sa canalisation entre les obstacles (infrastructures urbaines ou industrielles) (Khlaifi et al., 2009; Krysta et al., 2006; Lushi et Stockie, 2010; Rudd et al., 2012).

Actuellement et d'après nos connaissances, la seule étude d'inversion de terme source en présence d'obstacles basé sur un modèle opérationnel (spécifique au traitement des écoulements dans des milieux complexes) est celle de Glascoe et al. (2006) qui ont utilisé le modèle de dispersion atmosphérique UDM (Urban Dispersion Model) pour reconstruire une source de pollution dans un réseau de rues. UDM (Hall et al., 2001) est un modèle à panache gaussien modifié à l'aide de relations empiriques déduites d'essais expérimentaux (Neuman et al., 2006). Brooks et al. (2002) ont validé ce modèle en comparant statistiquement ses résultats numériques avec trois campagnes de mesures différentes : les expériences de MacDonald (MacDonald et al., 1997), les essais de Mock Urban Setting (MUST) (Biltoft, 2001) et les mesures in situ de Salt Lake City Urban 2000 (Allwine et al., 2002). Dans l'étude de Glascoe et al. (2006), l'algorithme d'échantillonnage stochastique (MCMC) et l'approche bayésienne ont été couplés avec le modèle UDM afin de reconstruire les paramètres de la source de pollution au moyen des mesures de concentration de la campagne expérimentale Joint Urban 2003 à Oklahoma City. Cette étude a montré que le modèle de dispersion UDM est incapable d'estimer correctement la position de la source. Néanmoins, il peut être utilisé comme un préprocesseur pour rapprocher globalement la zone de localisation de la source (réduire la zone de recherche) avant d'appliquer les modèles CFD dans la suite pour avoir des solutions plus précises.

## **I.2.2. Questions scientifiques et originalité**

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous abordons différentes questions scientifiques concernant la modélisation inverse et directe de la dispersion atmosphérique telles que :

- Quel est l'impact des différents paramètres des modèles d'échange verticaux entre la canopée et l'atmosphère sus-jacente, et de transferts aux intersections des rues sur la fiabilité des modèles opérationnels du réseau de rues de type SIRANE et SIRANERISK ?
- Comment construire une plate-forme opérationnelle de modélisation inverse spécifique pour résoudre des problèmes sur des configurations complexes (urbaines ou industrielles) ?

- Une fois le problème inverse posé d'une manière linéaire, est-ce que la résolution classique et les méthodes d'optimisation conventionnelles utilisées dans d'autres domaines d'applications sont suffisantes pour reproduire le terme source ?
- Quelle est la performance du couplage d'un algorithme inverse avec les codes opérationnels SIRANE et SIRANERISK pour résoudre des problèmes inverses de dispersion atmosphérique à l'échelle locale en présence d'obstacles ?
- Quelle est la fiabilité des méthodes de régularisation qui ont été largement utilisées dans le domaine du traitement des signaux à reconstruire le terme source avec des signaux de concentration bruités ?
- Comment estimer les émissions d'une source accidentelle en utilisant des signaux de concentration ponctuels et quel est l'impact de la variabilité turbulente des signaux sur la qualité de résultats d'inversion ?
- Comment peut-on appliquer la modélisation inverse pour identifier le débit et la position d'une source de pollution atmosphérique à l'échelle d'un quartier ? Quel est l'impact du positionnement des récepteurs et de fonctions coûts à optimiser sur la performance de la méthode inverse et sur sa mise en place d'une manière opérationnelle dans la pratique ?

### **I.2.3. Choix de l'utilisation des modèles SIRANE/SIRANERISK**

L'étude de la dispersion des polluants dans les milieux complexes à forte densité d'obstacles comme la canopée urbaine a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche pendant les dernières décennies (Belcher et al., 2003; Carpentieri et al., 2009; Coceal et Belcher, 2005, 2004; Hertel et Berkowicz, 1989; MacDonald, 2000; Robins et al., 2002; Scaperdas et al., 1998; Simoëns et Wallace, 2008; Soulhac et al., 2008). Aujourd'hui, divers modèles sont utilisés pour traiter l'écoulement et la dispersion dans les zones urbaines. Ces modèles ont souvent été classés suivant leurs concepts théoriques et parfois suivant leurs fins opérationnelles. L'objectif de ces travaux est de trouver le compromis entre la performance des approches utilisées, la spécificité de l'écoulement dans ces milieux complexes et la réduction de temps de calcul nécessaire afin de répondre à des besoins pratiques et opérationnels.

À ce jour, les modèles opérationnels de dispersion de pollution atmosphérique dans les zones urbaines sont principalement basés sur trois catégories qui diffèrent par leurs complexités croissantes de description de la géométrie urbaine et qui impliquent souvent une augmentation dans le coût de calcul.

#### **I.2.3.1. Modèles rue-canyon**

L'approche « rue-canyon » consiste à décrire schématiquement une rue comme une cavité parallélépipédique, caractérisée par sa largeur  $W$ , sa hauteur  $H$  et sa longueur  $L$ . Cette approche s'applique généralement aux quartiers denses, lorsque les bâtiments sont suffisamment rapprochés. Elle est largement utilisée pour étudier l'écoulement et la dispersion des polluants émis par la circulation automobile. Plusieurs modèles de dispersion atmosphérique, comme ADMS-Urban (McHugh et al., 1997), SBLIN (Namdeo et Colls, 1996), OSPM (Berkowicz et al., 1994) et CPBM (Yamartino et Wiegand, 1986), sont fondés sur ce concept de rue-canyon. L'application de cette approche nécessite une bonne maîtrise des flux échangés entre la rue et l'atmosphère, pour bien évaluer les concentrations en polluants. La plupart de ces modèles permettent de décrire la distribution de concentration à l'intérieur de la rue.

### **I.2.3.2. Modèles réseau des rues**

Les modèles de réseau de rues ont été considérés comme une généralisation de l'approche rue-canyon qui permet de modéliser un quartier à travers la prise en compte des interactions entre les différentes rues aux intersections. Souvent, le réseau de rues est représenté par une grille dont les rues et les intersections sont désignées respectivement par des tronçons (segments) et des nœuds. Le principe fondamental de ce type de modèles est basé sur le calcul des bilans de masse (flux) à différents niveaux de ce réseau. Cela a été effectué de différentes manières d'un modèle à l'autre suivant les paramétrages adoptés pour modéliser les processus de transport et de dispersion mis en jeu. Soulhac (2000) a développé le premier modèle de dispersion atmosphérique de réseau des rues, le modèle SIRANE (Soulhac et al., 2011). Ce modèle a montré une grande performance dans plusieurs études académiques et pratiques sur plusieurs villes européennes (Carpentieri et al., 2012; Castagnetti et al., 2008; Garbero et al., 2010; Giambini et al., 2010; Soulhac et al., 2012, 2003). Bien que cette catégorie de modèles soit souvent considérée comme des outils stationnaires de modélisation parce qu'ils ne fournissent que la moyenne temporelle de la concentration dans chaque tronçon de rue, Lamaison et al. (2011) ont développé une nouvelle formulation qui permet de décrire la variation des concentrations dans chaque rue. Cette approche (SIRANERISK) a été intégrée dans l'outil SIRANE pour permettre de prendre en compte des rejets instationnaires dans un réseau de rues et au-dessus de la canopée urbaine par un modèle à bouffées gaussiennes modifié (Soulhac, 2013). Ces deux modèles de dispersion sont présentés et validés dans la première partie de ce travail (sections II.1 et II.2). Nous utilisons dans la suite notre algorithme inverse avec le modèle SIRANE pour identifier une source stationnaire et avec le modèle SIRANERISK pour reconstruire les rejets accidentels.

### **I.2.3.3. Modèles CFD et CFD « simplifiés »**

Les modèles Eulériens sont basés sur une résolution numérique des équations de la mécanique des fluides sur un maillage du domaine considéré. On parle également de Computational Fluid Dynamic (CFD). Les modèles CFD se partagent principalement en trois types (RANS, LES, DNS), selon l'approche retenue pour modéliser ou simuler la turbulence. Les modèles eulériens CFD permettent de décrire les écoulements dans des environnements complexes, en tenant compte des obstacles et du relief. Cependant, ils requièrent des temps de calculs importants qui les rendent encore difficilement applicables dans des contextes opérationnels. C'est pour cette raison que des modèles dit « CFD simplifiés » ont également été développés. Cette catégorie de modèles repose généralement sur l'utilisation conjointe de deux modèles différents pour simuler l'écoulement et la dispersion en présence d'obstacles. La résolution de l'écoulement est basée sur des modèles simplifiés dits « mass-consistant », dans lesquels seule l'équation de conservation de la masse est résolue. La résolution de la dispersion est effectuée par des approches Eulériennes ou Lagrangiennes. Les deux modèles les plus célèbres de cette catégorie sont QUIC-URB (Brown et al., 2009; Röckle, 1990) et MSS-Spray (Moussafir et al., 2004; Tinarelli et al., 2007). Vendel (2011) a développé, dans le cadre de ces travaux de thèse, une approche alternative basée sur un modèle stochastique Lagrangien (SLAM) couplé avec l'approche FlowAir'3D, qui consiste à reconstituer l'écoulement par interpolation dans une base de données de champs de vent préalablement calculés. Ce modèle a montré sa capacité à reproduire la dispersion des polluants dans des configurations industrielles assez complexes (raffinerie de Feyzin).

## **I.2.4. Démarche adoptée**

Pour répondre aux objectifs et à questions scientifiques citées ci-dessus, nous adopterons la démarche décrite dans les paragraphes suivants :

### **I.2.4.1. Validation des modèles directs de dispersion atmosphérique**

Puisque la fiabilité des résultats d'estimation du terme source dépend des performances des modèles de prévision physique, nous avons commencé notre travail par la validation de nos codes directs utilisés dans cette étude. Dans la première partie, nous avons présenté brièvement le modèle SIRANE et nous avons évalué sa performance en fonction du paramétrage de ses différentes approches utilisées pour modéliser les écoulements à l'intérieur de la canopée urbaine. Dans la deuxième partie, après avoir présenté le nouveau code SIRANERISK et son processus de simulation des rejets instationnaires, nous avons exposé une étude de validation de ce modèle en comparant ses résultats avec des mesures expérimentales effectuées en soufflerie. Il s'agit de simulations expérimentales de rejets stationnaires et instantanés effectuées à l'échelle d'un quartier (avec et sans bâtiments). Ces expériences sont réalisées sur des configurations académiques qui englobent plusieurs situations météorologiques (variation de la direction et de la vitesse du vent).

### **I.2.4.2. Développement de l'algorithme inverse**

Après avoir validé les modèles directs de dispersion et traité les données expérimentales à utiliser, nous présentons dans la section (III.1) une étude bibliographique sur les problèmes inverses et les principales méthodes de résolution. Puis nous décrivons dans la section (III.2) le principe détaillé de l'algorithme inverse développé dans le cadre de ces travaux. Il s'agit d'une approche qui englobe à la fois plusieurs techniques de résolution et d'optimisation adoptées pour ce type de problème. Elle repose sur une formulation linéaire du problème inverse en profitant de la linéarité qui relie les concentrations mesurées aux émissions des sources de pollution. Le traitement du problème est effectué suivant les dimensions et la nature du système inverse (sous-déterminé, surdéterminé,...). La méthode utilisée a été classée comme un cas particulier d'une méthode variationnelle d'assimilation de données (Bocquet, 2010; Jeong et al., 2005).

### **I.2.4.3. Etude de sensibilité de la méthode inverse**

Avant de passer à l'application de notre système de modélisation inverse sur des mesures expérimentales, nous avons testé, à la fin de la section (III.2), la sensibilité de cet algorithme aux paramètres d'entrée en utilisant des observations synthétiques fournies par des modèles directs de dispersion atmosphérique, comme présenté par Allen et al. (2007) et Cervone et Franzese (2010). Dans cette partie, nous avons identifié les limites de notre approche inverse par rapport à la qualité des observations (bruitage des observations, fréquence de mesure,...) et des paramètres météorologiques (direction et vitesse du vent,...).

### **I.2.4.4. Application du système de modélisation inverse avec des mesures**

Dans une dernière étape, nous avons testé la performance de notre algorithme inverse à reproduire correctement les paramètres d'une source (débit et position) en utilisant des observations expérimentales (Partie IV).

Nous avons évalué, dans la première section (IV.1), les propriétés statistiques des erreurs obtenues en appliquant notre système de modélisation inverse afin de discuter de sa fiabilité à des fins opérationnelles. Les essais de recherche des débits d'émissions instantanées ont été effectués sur différentes configurations : sans et avec obstacles (couche limite turbulente ou quartier idéalisé)

en utilisant comme mesures les signaux réels turbulents de concentration (signaux instantanés de concentration). L'inversion a été également effectuée en utilisant la moyenne d'ensemble de tous les signaux (100 signaux pour chaque récepteur) comme données d'entrée. La comparaison de ces deux approches, présentée dans la section (IV.1), nous permet de discuter de la fiabilité de notre algorithme inverse dans des situations réelles en utilisant des modèles de dispersion atmosphérique basés sur la notion de moyenne d'ensemble.

Ensuite, dans le deuxième chapitre (IV.2) de cette partie, nous avons réalisé une étude de sensibilité de notre méta-algorithme inverse (qui permet de reproduire la position et le débit à la fois) par rapport aux emplacements des récepteurs et aux critères de choix de la meilleure solution. Les fonctions coûts sont testées sur des situations fictives académiques en utilisant des mesures synthétiques fournies par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK. L'objectif est d'évaluer la performance de chaque critère à identifier le bon débit et la vraie position de la source.

Enfin, nous avons étudié la fiabilité de cet algorithme à reproduire le débit et la position de la source dans un milieu urbain complexe en utilisant plusieurs configurations de récepteurs installés à l'intérieur de la canopée urbaine.

### I.2.5. Références

- Allen, C.T., Young, G.S., Haupt, S.E., 2007. Improving pollutant source characterization by better estimating wind direction with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 41, 2283–2289.
- Allwine, K.J., Shinn, J.H., Streit, G.E., Clawson, K.L., Brown, M., 2002. Overview of URBAN 2000: A Multiscale Field Study of Dispersion through an Urban Environment. *Bull. Am. Meteorol. Soc.* 83, 521–536.
- Bady, M., 2013. Fundamentals of Direct Inverse CFD Modeling to Detect Air Pollution Sources in Urban Areas. *Comput. Water Energy Environ. Eng.* 02, 31–42.
- Belcher, S.E., Jerram, N., Hunt, J.C.R., 2003. Adjustment of a turbulent boundary layer to a canopy of roughness elements. *J Fluid Mech* 488, 369–398.
- Berkowicz, R., Hertel, O., Sorensen, N.N., Michelsen, J.A., 1994. Modelling air pollution from traffic in urban areas., in: IMA Conference on Flow and Dispersion Through Groups of Obstacles.
- Biltoft, C.A., 2001. Customer report for Mock Urban Setting Test. West Desert Test Center U.S. Army Dugway proving ground.
- Bocquet, M., 2010. Modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique accidentelle : progrès récents. *Pollut. Atmos.*
- Brereton, C.A., Johnson, M.R., 2012. Identifying sources of fugitive emissions in industrial facilities using trajectory statistical methods. *Atmos. Environ.* 51, 46–55.
- Brooks, M., Beck, N.V., Clem, C.M., Strickland, D.C., Griffiths, I.H., Hall, D.J., Kingdon, R.D., Hargrave, J., 2002. Validation of the Urban Dispersion Model (UDM). In *Proceedings of 8th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, Sofia, Bulgaria, 14-17 October 2002, pp.8-12.
- Brown, M., Gowardhan, A., Nelson, M., Williams, M., Pardyjak, E., 2009. Evaluation of the QUIC wind and dispersion models using the Joint Urban 2003 Field Experiment dataset,. *AMS 8th Symp Urban Env Phoenix AZ* 16.
- Carpentieri, M., Robins, A.G., Baldi, S., 2009. Three-Dimensional Mapping of Air Flow at an Urban Canyon Intersection. *Bound.-Layer Meteorol.* 133, 277–296.
- Carpentieri, M., Salizzoni, P., Robins, A., Soulhac, L., 2012. Evaluation of a neighbourhood scale, street network dispersion model through comparison with wind tunnel data. *Environ. Model. Softw.* 37, 110–124.
- Castagnetti, F.B., Salizzoni, P., Garbero, V., Genon, G., Soulhac, L., 2008. Atmospheric pollution modelling in urban areas at local scale: An exemple of the application to a neighborhood in Turin. *Geog. Ambient. E Mineraria* 124, 63–76.

- Cervone, G., Franzese, P., 2010. Monte Carlo source detection of atmospheric emissions and error functions analysis. *Comput. Geosci.* 36, 902–909.
- Chow, F.K., Kosović, B., Chan, S., 2008. Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 1553–1572.
- Coceal, O., Belcher, S.E., 2004. A canopy model of mean winds through urban areas. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 130, 1349–1372.
- Coceal, O., Belcher, S.E., 2005. Mean winds through an inhomogeneous urban canopy. *Bound.-Layer Meteorol.* 115, 47–68.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Berrone, S., Soulhac, L., 2010. Air pollution modelling at the urban scale and population exposure: a case study in Turin. In: 31st NATO/ SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and Its Application, 27 Sepe01 Oct, 2010, Torino, Italy.
- Giambini, P., Salizzoni, P., Soulhac, L., Corti, A., 2010. Influence of meteorological input parameters on urban dispersion modeling for traffic scenario analysis. In: 31st NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and Its Application, 27 Sepe01 Oct, 2010, Torino, Italy.
- Glascoe, L., Neuman, S., Kosović, B., Dyer, K., Hanley, W., Nitao, J., 2006. Event reconstruction for atmospheric releases employing urban puff model UDM with stochastic inversion methodology, in: 86th AMS Annual Meeting.
- Hall, D.J., Spanton, A.M., Griffiths, I.H., Hargrave, M., Walker, S., John, C., 2001. The UDM: a puff model for estimating dispersion in urban areas. In *Proceedings of 7th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, Belgirate, Italy, pp.256-260.
- Hertel, O., Berkowicz, R., 1989. Modelling pollution from traffic in a street canyon. Evaluation of data and model development. *DMU Luft A-129, NERI.*
- Jeong, H.-J., Kim, E.-H., Suh, K.-S., Hwang, W.-T., Han, M.-H., Lee, H.-K., 2005. Determination of the source rate released into the environment from a nuclear power plant. *Radiat. Prot. Dosimetry* 113, 308–313.
- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment. *Atmos. Environ.* 41, 465–479.
- Khlaifi, A., Ionescu, A., Candau, Y., 2009. Pollution source identification using a coupled diffusion model with a genetic algorithm. *Math. Comput. Simul.* 79, 3500–3510.
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Armand, P., 2011. Presentation of siranerisk-2.0 – A decision-support oriented computational tool adapted to the dispersion of deleterious rbc agent in the urban atmospheric environment – Examples of application.
- Lien, F.S., Yee, E., Ji, H., Keats, A., Hsieh, K.J., 2006. Application of CFD to Security Science: Progress on the Development of a High-Fidelity Numerical Model for Hazard Prediction and Assessment in the Urban Environment. *CFD Society of Canada Bulletin* #17 9–16.
- Lushi, E., Stockie, J.M., 2010. An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources. *Atmos. Environ.* 44, 1097–1107.
- MacDonald, R.W., 2000. Modelling the mean velocity profile in the urban canopy layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 97, 25–45.
- MacDonald, R.W., Griffiths, R.F., Cheah, S.C., 1997. Field experiments of dispersion through regular arrays of cubic structures. *atm* 31, 783–795.
- McHugh, C.A., Carruthers, D.J., Edmunds, H.A., 1997. ADMS-urban: an air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution. *Int. J. Environ. Pollut.* 8, 666–674.
- Moussafir, J., Oldrini, O., Tinarelli, G., Sontowski, J., Dougherty, C., 2004. A new operational approach to deal with dispersion around obstacles: the MSS (Micro- Swift-Spray) software suite. *Proc. 9th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes* 2, 114–118.

- Namdeo, A.K., Colls, J.J., 1996. Development and evaluation of SBLINE, a suite of models for the prediction of pollution concentrations from vehicles in urban areas. *St. 189–90*, 311–320.
- Neuman, S., Glascoe, L., Kosovic, B., Dyer, K., Hanley, W., Nitao, J., Gordon, R., 2006. Event reconstruction for atmospheric releases employing urban puff model UDM with stochastic inversion methodology.
- Robins, A., Savory, E., Scaperdas, A., Grigoriadis, D., 2002. Spatial Variability and Source-Receptor Relations at a Street Intersection. *Water Air Soil Pollut. Focus 2*, 381–393.
- Röckle, R., 1990. Bestimmung der Strömungsverhältnisse im Bereich Komplexer Bauungsstrukturen. Ph.D. thesis, Vom Fachbereich Mechanik, der Technischen Hochschule Darmstadt, Germany.
- Rudd, A.C., Robins, A.G., Lepley, J.J., Belcher, S.E., 2012. An Inverse Method for Determining Source Characteristics for Emergency Response Applications. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 1–20.
- Scaperdas, A., Colvile, R., Robins, A., 1998. Dispersion modelling at urban street canyon intersections: a comparison of CFD with wind tunnel modelling, in: 5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Rodos Greece.
- Simoëns, S., Wallace, J.M., 2008. The flow across a street canyon of variable width—Part 2: Scalar dispersion from a street level line source. *Atmos. Environ.* 42, 2489–2503.
- Soulhac, L., 2000. Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine. Phd Thesis. Ecole Centrale de Lyon, Lyon.
- Soulhac, L., 2013. Ecoulement et dispersion turbulente dans la couche limite atmosphérique.
- Soulhac, L., Perkins, R.J., Salizzoni, P., 2008. Flow in a street canyon for any external wind direction. *Bound.-Layer Meteorol.* 126, 365–388.
- Soulhac, L., Puel, C., Duclaux, O., Perkins, R.J., 2003. Simulations of atmospheric pollution in Greater Lyon an example of the use of nested models. *Atmos. Environ.* 37, 5147–5156.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. *Atmos. Environ.* 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D., Rios, I., 2012. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part II, validation of the model on a real case study. *Atmos. Environ.* 49, 320–337.
- Tinarelli, G., Brusasca, G., Oldrini, O., Anfossi, D., Castelli, S.T., Moussafir, J., 2007. Micro-Swift-Spray (MSS): A New Modelling System for the Simulation of Dispersion at Microscale. General Description and Validation, in: Borrego, C., Norman, A.-L. (Eds.), *Air Pollution Modeling and Its Application XVII*. Springer US, pp. 449–458.
- Vendel, F., 2011. Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels. Ecole Centrale de Lyon, Lyon.
- Yamartino, R.J., Wiegand, G., 1986. Development and evaluation of simple models for the flow, turbulence and pollutant concentration fields within an urban street canyon. *Atmos. Environ.* 20, 2137–2156

---

## **Deuxième partie**

# **Modélisation directe de la dispersion atmosphérique**

---



## II.1. Modélisation d'un écoulement stationnaire dans un réseau de rues

---

*Ce chapitre est constitué d'un article qui a été soumis au journal Boundary Layer Meteorology : "Modelling pollutant dispersion in a street network". Il s'agit d'une étude de validation du modèle de dispersion atmosphérique SIRANE. Ce modèle de réseau de rues permet de simuler la dispersion des polluants atmosphériques dans les zones urbaines en considérant que l'atmosphère urbaine se décompose en deux sous-domaines: la couche limite urbaine et la canopée urbaine. Nous visons, dans cette section, l'évaluation de la fiabilité des paramétrages adoptés pour simuler les phénomènes physiques mis en jeu, en mettant l'accent sur leur dépendance éventuelle par rapport à la direction du vent externe. Pour ce faire, nous avons comparé les résultats du modèle numérique avec des mesures en soufflerie effectuées sur une configuration académique d'un quartier urbain idéalisé.*

---

### II.1.1. Abstract

This study constitutes a further step in the analysis of the performances of a street network model to simulate atmospheric pollutant dispersion in urban areas. The model, named SIRANE (Soulhac et al., 2011), is based on a decomposition of the urban atmosphere in two sub-domains: the urban boundary layer, whose dynamics is assumed to be well established, and the urban canopy, represented as a series of interconnected boxes. Parametric laws govern the mass exchanges between the boxes, under the assumption that the pollutant dispersion within the canopy can be fully simulated modelling three main bulk transfer phenomena: the channelling along street axes, the transfers at street intersections and the vertical exchange between street canyon, and overlying atmosphere.

We aim in evaluating the reliability of the parameterisations adopted to simulate these phenomena, with a focus on their eventual dependence on the direction of the external wind. To that purpose we test the model against concentration measurements within an idealised urban district, whose geometrical layout closely matches the street network assumption made in SIRANE (Garbero et al., 2010). The analysis is performed over a district array with a fixed geometry and a varying wind incidence angle.

Results show that the model provides generally good results with the reference parameterisations adopted in SIRANE and that its performances are quite robust for a wide range of the model parameters. This proves the reliability of the street network approach in simulating pollutant dispersion in densely packed city districts. Results also show that, for wind directions attaining 45° according to the district principal axis, the model performances may be improved by increasing the values of the wind fluctuations at street intersection and of the vertical exchange velocity. This opens the way for further investigations to clarify the dependence of these parameters on wind direction and street aspect ratios.

**Key words:** Dispersion models, urban air pollution, street network, wind tunnel experiments.

### II.1.2. Introduction

To date, the operational models for atmospheric dispersion of pollutants in urban areas are mainly based on three different categories, that assume an increasing complexity in the description

on the urban geometry, and that imply an increasing computational cost: street canyon models, e.g. SBLINE (Namdeo and Colls, 1996) and ADMS-Urban (McHugh et al., 1997), street network models, e.g. SIRANE (Soulhac et al., 2011), and building-resolved models, e.g. QUIC-URB (Brown et al., 2009; Röckle, 1990) and MSS-Spray (Moussafir et al., 2004; Tinarelli et al., 2007).

Street Canyon models are basically modified Gaussian dispersion models. They do not explicitly solve the flow as modified by the presence of buildings. Their effect on flow and dispersion is taken into account indirectly, by means of specific parameterisations, simulating the street canyon trapping effect (Hertel and Berkowicz, 1989). Conversely, building resolved models aim in a detailed description of the flow within the urban canopy, which is attained both with prognostic (Gowardhan et al., 2011) or diagnostic models (Duchenne et al., 2011). This detailed description is the basis for the simulation of the dispersion of airborne pollutants with Lagrangian stochastic models (Moussafir et al., 2004) or Eulerian models (Gowardhan et al., 2011).

In the middle is the 'street network' approach, that constitutes the object of the present study, and that can be thought as a compromise between the two former approaches in terms of physical processes taken into account and of computation cost that allows operational application. This is based on a simplified representation of the urban geometry and on the parameterisations of the main phenomena that drive the pollutant transfer in urban areas.

As far as we are aware, the street network approach has been to date implemented only in the SIRANE model (Soulhac et al., 2011), developed by the AIR group at the Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique of the Ecole Centrale de Lyon. SIRANE is based on the coupling of a street network model, for the dispersion in the urban canopy, with a Gaussian plume model, for that in the overlying boundary layer. In the network, it is assumed that dispersion is governed by only three bulk exchange phenomena, namely: the pollutant retention in street canyon due to the recirculating patterns within it, their channelling along the street axes and their transfer at street intersection. These are regulated by three parameters:

- Wind horizontal fluctuations at street intersections  $\sigma_{\phi_i}$
- The advective velocity along the street axes, referred to as  $U_{street}$ ;
- The mass transfer velocity between the street canyon and the atmosphere  $u_d$ .

To date, the performances of the model SIRANE have been tested in a large number of cities against field data (Castagnetti et al., 2008; Garbero et al., 2010a; Giambini et al., 2010; Soulhac et al., 2012, 2003). When applied to real cases, SIRANE is used as a part of a modelling chain including also a traffic model and an emissions model (Soulhac et al., 2012, 2003). As it was shown by Soulhac et al. (2012), the highest uncertainties of this modelling chain are due to the estimates of the strengths of the pollutant sources that are mainly related to traffic induced emissions. The second main source of error is that related to the wind intensity. Both of them do not depend on the specific parameterisations included in SIRANE. In order to evaluate these parameterisations it is therefore necessary to test the model against wind tunnel experimental results, which allow for a control of the strength of the source emissions and of the wind intensity.

With this aim, Carpentieri et al. (2012) compared the results provided by SIRANE with concentration data collected in wind tunnel experiments on a small scale model of the DAPPLE site, in the London city centre (Robins, 2011; 2008). In this study, the uncertainty associated to the source term and to the velocity of the incident wind was removed. Therefore, the observed differences between numerical and experimental data were only due to the parameterisations of the flow and the dispersion in the urban boundary layer and the urban canopy. In that specific case study, the flow above the buildings was the result of an incident neutral boundary layer flow (obtained by combining

spires and roughness elements at the wall tunnel entrance and floor, respectively) with the reduced scale model. The flow above the simulated city district could therefore be considered in an adjustment phase, due to the change of the wall roughness, and therefore far from the equilibrium state assumed by SIRANE. A significant part of the errors in the model predictions observed in that case can then be reasonably attributed to the parameterisation of the flow and dispersion above the buildings.

In this work, we aim in further constraining the object of our analysis and focus on the parameterization of the dispersion phenomena in the urban canopy only, since these constitute the originality of the street network approach. To that purpose, we test the model in an idealised urban geometry made up of regularly spaced blocks, with a squared section and a same height, a configuration that has been previously used in wind tunnel experiments of passive scalar dispersion by Garbero et al. (2010b). The flow developing above this idealised urban configuration is a well established neutral boundary layer, whose depth is about 20 times the height of the urban blocks. The velocity field above the canopy is homogeneous in the horizontal plane (except close to the canopy top, in the roughness sub-layer) and its statistics are well modelled by self-similar relations, as a function of the vertical coordinate only. This configuration allows us to minimise the uncertainties in the model predictions related to the parameterisation of the flow and the dispersion in the external atmospheric flow and enlightens the role of the parameters controlling the pollutant dispersion within the canopy, i.e.  $U_{street}$ ,  $\sigma_\varphi$  and  $u_d$ .

These parameters can be hardly estimated theoretically, except for very specific cases. For example, in its present version, SIRANE adopts parameterisations for  $U_{street}$  and  $u_d$  given by theoretical model that are originally developed referring to a street of infinite length (Soulhac et al., 2013; 2008). It is however questionable if these parameterization can be reliably applied on fully three-dimensional configurations, within which the flow and dispersion patterns are more complex than those observed in isolated street canyon flows (Coceal et al., 2006; Princevac et al., 2010).

In what follows, we begin by presenting the principles of the model SIRANE and the main parameterisations implemented in it (II.1.3). We then provide a description of the experimental set-up on which the model is tested and of the associated velocity field (II.1.4). We present the parameterisations of the external flow and dispersion (II.1.5.1) and the range of variability (II.1.5.2) of the parameters  $U_{street}$ ,  $\sigma_\varphi$  and  $u_d$  over which the model performances are evaluated. A systematic comparison between experimental and numerical results is given in (II.1.6) together with a sensitivity analysis of the model performances on the variations of the model parameters  $U_{street}$ ,  $\sigma_\varphi$  and  $u_d$ .

### II.1.3. Description of the model SIRANE

SIRANE adopts a decomposition of the urban atmospheric boundary layer in two distinct sub-domains: the urban canopy and the external flow. The urban canopy is represented as a network of interconnected streets, within which the mass transfer phenomena are controlled by parametric laws. The external flow is assumed to be an atmospheric boundary layer that has reached an equilibrium state.

In this section we present the key assumptions adopted to simulate the flow and dispersion in these two sub-domains. For further details the reader is addressed to Soulhac et al. (2011).

#### II.1.3.1. Flow and dispersion above the urban canopy

The parameterisation of the velocity field above the urban canopy is based on the Monin-Obukhov similarity theory. The presence of the roughness sub-layer just above the urban canopy is

neglected and the external flow is assumed to be uniform in the horizontal plane. The flow is modelled with self-similar relations, that parameterise the mean longitudinal velocity, referred to as  $U$ , and the standard deviation of the transversal and vertical velocity components, referred to as  $\sigma_y$  and  $\sigma_w$ , respectively.

Pollutants sources emitting directly in the external atmosphere (roof chimneys, industrial emissions...) are modelled as point sources. Emissions from street canyons (II.1.3.2.4) and intersections (II.1.3.2.3) into the overlying atmosphere (due to pollutant sources placed within the canopy and due to the exchange between the canopy and the overlying atmosphere) are modelled as line sources, represented by a series of point sources at roof level. The concentration induced by each point source is calculated using the Gaussian plume model, whose general form is

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z U_p} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y^2}{\sigma_y^2} + \frac{z^2}{\sigma_z^2} \right) \right] \quad (\text{II.1-1})$$

where  $C$  is the pollutant mean concentration,  $Q$  is the emission rate of pollutant at the source,  $U_p$  is wind velocity at the height of the plume centre of mass and  $\sigma_y$  and  $\sigma_z$  represent the lateral and vertical plume spreading, respectively. As customary, eq. (II.1-1) is adjusted in order to take into account plume reflections at the canopy top and at the upper limit of the boundary layer as well as eventual plume rise effects (Marro et al., 2014). For further details on these parameterisations and on those adopted for  $\sigma_y$  and  $\sigma_z$  the reader is addressed to Soulhac et al. (2011).

### II.1.3.2. Flow and dispersion within the urban canopy

#### II.1.3.2.1. The street network approach

SIRANE adopts a simplified description of the urban geometry (Figure II.1-a), which is described as a network of streets, represented by segments, connected by intersections, represented by nodes. Each street is represented as a box of height  $H$ , width  $W$  and length  $L$ , within which the concentration, referred to as  $C_{street}$  is assumed to be well-mixed (Figure II.1-b).

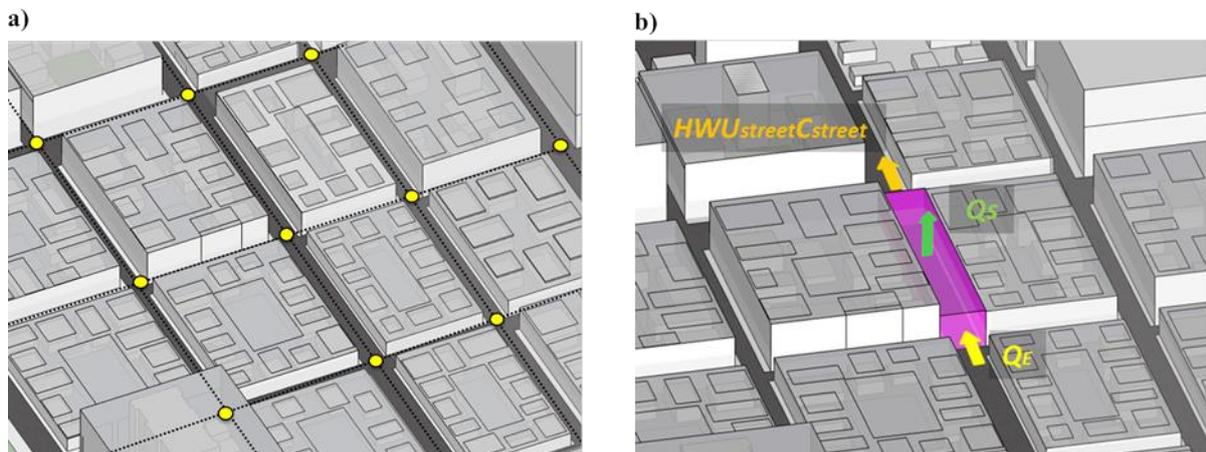


Figure II.1: The street network approach to represent an urban district. (a) Topology of a network of streets: segments and nodes. (b) Box model for each street, with corresponding flux balance.

With this modelling approach, assuming stationary condition, the mass balance within each street canyon can be expressed as

$$Q + Q_E - HWU_{street} C_{street} - Q_{turb} = 0 \quad (\text{II.1-2})$$

where  $Q$  represents the pollutant emission within each street,  $Q_E$  is the mean advective flux entering in the street at the upwind intersection,  $Q_{turb}$  is the mass turbulent flux between the street and the

overlying atmosphere and  $HWU_{street} C_{street}$  is the mean advective flux of pollutant at the downwind intersection, being  $U_{street}$  the spatially averaged velocity (along the canyon axis) within the street. Combining eq. (II.1-2) with the Gaussian plume model, eq. (II.1-1) allows us to build a linear system whose solutions are the time-averaged concentration within and above each street in the urban canopy. In the next paragraphs we shortly present the parametric relations adopted by SIRANE to compute the velocity  $U_{street}$  and the fluxes  $Q_S$  and  $Q_E$ .

### II.1.3.2.2. Average velocity within the street: $U_{street}$

The wind velocity within the street canyons is computed by means of a model that assumes a balance between the shear stresses exerted at roof level by the external atmospheric flow and the drag due to the distributed aerodynamic roughness on building walls, neglecting any effect due to pressure gradient and those related to momentum sources due to the circulation of vehicles within streets. In these conditions, for any direction of the external wind, the streamlines of the velocity field within the streets produce an helicoid (Dobre et al., 2005; Soulhac et al., 2008). The only component of the mean velocity vector that contributes to the transfer of mass out of the street in the horizontal plane is that parallel to the mean street axis. Soulhac et al. (2008) showed, with theoretical considerations that, in the idealised case of a street of infinite length, this velocity could be modelled as:

$$U_{street} = U_H \cos(\varphi) \frac{\delta_i^2}{HW} \left[ \frac{2\sqrt{2}}{c} (1-\beta) \left( 1 - \frac{c^2}{3} + \frac{c^4}{45} \right) + \beta \frac{2\alpha-3}{\alpha} + \left( \frac{W}{\delta_i} - 2 \right) \frac{\alpha-1}{\alpha} \right] \quad (II.1-3)$$

Where

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \ln \left( \frac{\delta_i}{z_{0,build}} \right) \\ \beta = \exp \left[ \frac{c}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{H}{\delta_i} \right) \right] \\ U_H = u_* \sqrt{\frac{\pi}{\sqrt{2}k^2 c} \left[ Y_0(c) - \frac{J_0(c)Y_1(c)}{J_1(c)} \right]} \\ \delta_i = \min(H; W/2) \end{array} \right. \quad (II.1-4)$$

and where  $c$  is the solution of

$$\frac{z_{0,build}}{\delta_i} = \frac{2}{c} \exp \left[ \frac{\pi Y_1(c)}{2 J_1(c)} - \gamma \right] \quad (II.1-5)$$

being  $J_0$ ,  $J_1$ ,  $Y_0$  and  $Y_1$  Bessel functions,  $\gamma = 0.577$  the Euler constant,  $u_*$  the friction velocity of the external flow,  $\varphi$  the wind direction according to the street axis and  $z_{0,build}$  the roughness of the buildings wall. The velocity  $U_{street}$  is used to compute the mass balance in each street, given by eq. (II.1-2), and to compute flow and dispersion in street intersections (II.1.3.2.3). It is worth noting that, assuming a street of infinite length implies neglecting all dynamical effect induced by the presence of the street intersection in the flow within the street.

### II.1.3.2.3. Pollutant fluxes at street intersections: $Q_E$

In recent years, the characteristics of flow and dispersion at a street intersection have been the object of a large number of studies (Balogun et al., 2010; Carpentieri et al., 2009; Dobre et al., 2005; Hoydysh and Dabberdt, 1994; Robins et al., 2002; Scaperdas et al., 1998), enlightening the

complexity of the flow patterns and the high variability of the concentration distribution within it. To model these features, SIRANE adopts a simplified approach, which however allows for a simulation of the concentration inhomogeneities within the intersection. The model, whose details can be found in Soulhac et al. (2009), is based on an exchange matrix  $P_{ij}$  with dimension  $N+1$  ( $N$  is the number of streets connected to the intersection) and whose coefficients represent the air flux outgoing the street  $i$  and entering the street  $j$ . The term with the  $N+1$  index represents the flux between the intersection and the atmosphere. The effect of atmospheric turbulence in this flux repartition is simulated by assuming that the wind direction is given by a random variable with a Gaussian probability density function  $f_\varphi$ . The air fluxes are then modelled as :

$$\overline{P}_{ij}(\varphi) = \int_{\varphi_0-3\sigma_\varphi}^{\varphi_0+3\sigma_\varphi} f(\varphi^* - \varphi) P_{ij}(\varphi^*) d\varphi^* \quad (II.1-6)$$

with:

$$f(\varphi^* - \varphi) = \frac{1}{\sigma_\varphi \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(\varphi^* - \varphi)^2}{\sigma_\varphi^2}\right) \quad (II.1-7)$$

where  $\varphi^*$  is the instantaneous wind direction, having  $\varphi$  as mean value and  $\sigma_\varphi$  as standard deviation. This latter value is computed by the SIRANE preprocessor as a function of the meteorological input data (Soulhac et al., 2011).

The air fluxes in each street  $i$  connected to the intersection are expressed as a function of the mean velocity within the street as:

$$P_{street,i} = \xi_i H_i W_i U_{street,i} \quad (II.1-8)$$

with  $\xi = 1$  for the streets placed upwind the intersection (incoming fluxes) and  $\xi = -1$  for the streets placed downstream (outgoing fluxes). The  $P_{ij}$  fluxes are calculated assuming a 2D repartition of the fluxes within the intersection. The vertical air flux can then be estimated, as the residual of the incoming and outgoing horizontal fluxes:

$$P_{vertical} = \sum_{i \in \text{intersection}} P_{street,i} \quad (II.1-9)$$

#### II.1.3.2.4. Turbulent fluxes between street and atmosphere: $Q_{turb}$

In a box-model approach the street/atmosphere vertical transfer in eq. (II.1-2) is expressed as

$$Q_{turb} = u_d (C_{street} - C_{ext}) WL \quad (II.1-10)$$

and therefore requires the estimate of a bulk exchange velocity  $u_d$ , that, strictly speaking, is defined as:

$$u_d = \frac{\iint_{S_{WL}} (\overline{c'w'} + \overline{c\bar{w}}) dS}{(C_{street} - C_{ext}) WL} \quad (II.1-11)$$

where  $\overline{c'w'}$  is the turbulent scalar flux,  $\overline{c\bar{w}}$  is the mean advective scalar flux,  $S_{WL}$  is the area of the street top (=WL) and  $C_{ext}$  is the pollutant concentration above the street canyon.

The experimental estimate of  $u_d$  represents a difficult task, since it requires a direct measurement of both the mean and the turbulent mass fluxes (Simoëns and Wallace, 2008; Vinçont et al., 2000) in a large number of geometrical configurations. Even its evaluation by means of LES simulation represents a non negligible effort due to the high computational costs needed to investigate the large variety of geometrical parameters that potentially affects the street-atmosphere exchange (e.g. Moonen et al., 2011). For these reasons the estimates of  $u_d$  available in

the literature mainly rely on indirect methods (Barlow et al., 2004; Narita, 2007; Salizzoni et al., 2009) and refer mainly to few idealised geometrical configurations.

In the idealised case of an infinite street, whose axis is perpendicular to the direction of the external wind, the mean vertical flux  $\overline{c'w}$  is null, and the transfer is due to the turbulent flux  $\overline{c'w'}$  only. This is due to the coupling of the instabilities generated within the shear layers developing at the top of the urban canopy and the eddies in the overlying atmospheric flow (Christen et al., 2007; Michioka and Sato, 2012; Perret and Savory, 2013; Salizzoni et al., 2011). To simulate this transfer, SIRANE adopts an analytical model of a shear layer at the street-atmosphere interface in the idealised case of a 2D canyon (Soulhac et al. 2013), which is coupled to dimensional considerations in order to estimate the size of the atmospheric eddies contributing to this mass exchange. As specified by Soulhac et al. (2011), the vertical mass flux can be then computed as :

$$u_d = \frac{\sigma_{wH}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{II.1-12})$$

where  $\sigma_{wH}$  is the standard deviation of the vertical velocity at roof height. Assuming similarity relations,  $\sigma_{wH}$  can be also expressed as a function of the friction velocity  $u_*$ , a parameter which is easier to estimate experimentally. Open field (Rotach, 1995; 1993) and laboratory experiments (Perret and Savory, 2013; Rafailidis, 1997; Salizzoni et al., 2008) indicate that  $u_* \leq \sigma_{wH} \leq 1.3u_*$ . With these upper and lower bounds the non-dimensional exchange velocity falls in the range  $0.22 \leq u_d/u_* \leq 0.29$ . These estimates turn out to be very close to that provided by Bentham and Britter (2003)  $u_d/u_* = 0.3$  by means of a bulk canopy model.

It is worth noting that, in the present version of the SIRANE model,  $u_d$  is assumed to be dependent only on the meteorological conditions of the external flow that fix  $\sigma_{wH}$  at roof height, and does not take into account the role of varying wind directions (according to each street axis) and the street aspect ratios. A discussion over the limitations imposed by this assumption is provided by Soulhac et al. (2013). Results presented in §5 allow us to further inquire on the dependence of  $u_d$  on  $\varphi$ .

#### II.1.4. Experiments

The experimental results used as a reference in this work are those presented by Garbero et al. (2010) concerning measurements of velocity and passive scalar concentrations within and above a reduced scale model of an idealised city district. Velocity measurements in the external flow have been used to set the parameterization of the boundary layer flow in the numerical simulations, whereas the passive scalar concentration measurements have been used as a benchmark to evaluate the model performances.

The idealised city district was made up by parallelepipeds with squared section, with lateral size  $L=250\text{mm}$  and height  $H=50\text{mm}$  representing 100m long and 20m high buildings at the 1:400 scale. Smaller scale roughness elements were disposed on each block in order to simulate the variety of the geometrical scales characterising the urban architecture (Salizzoni et al., 2008).

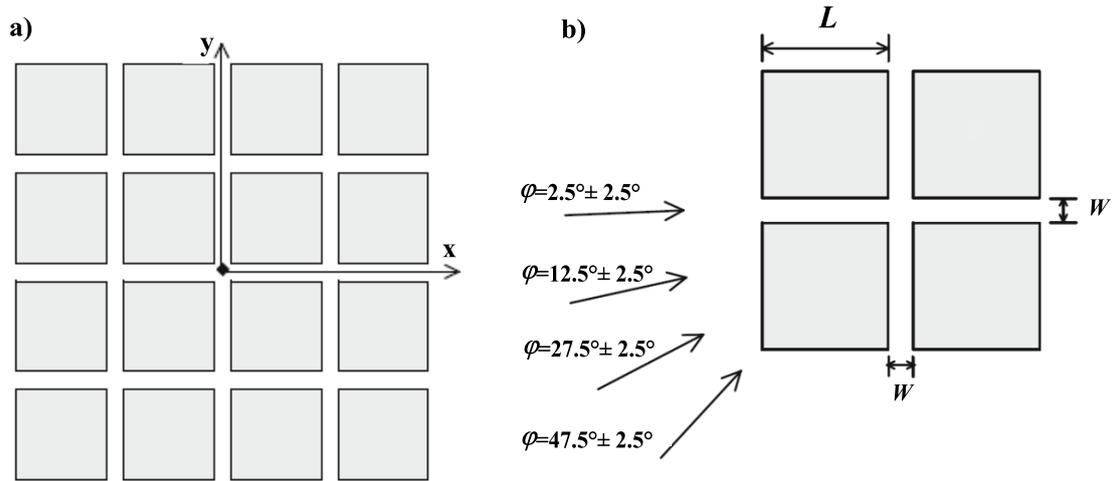


Figure II.2: (a) Set up of the obstacle array, referred to as Configuration 1, including the source release position (filled diamond) and (b) different wind directions investigated used by Garbero et al. (2010b).

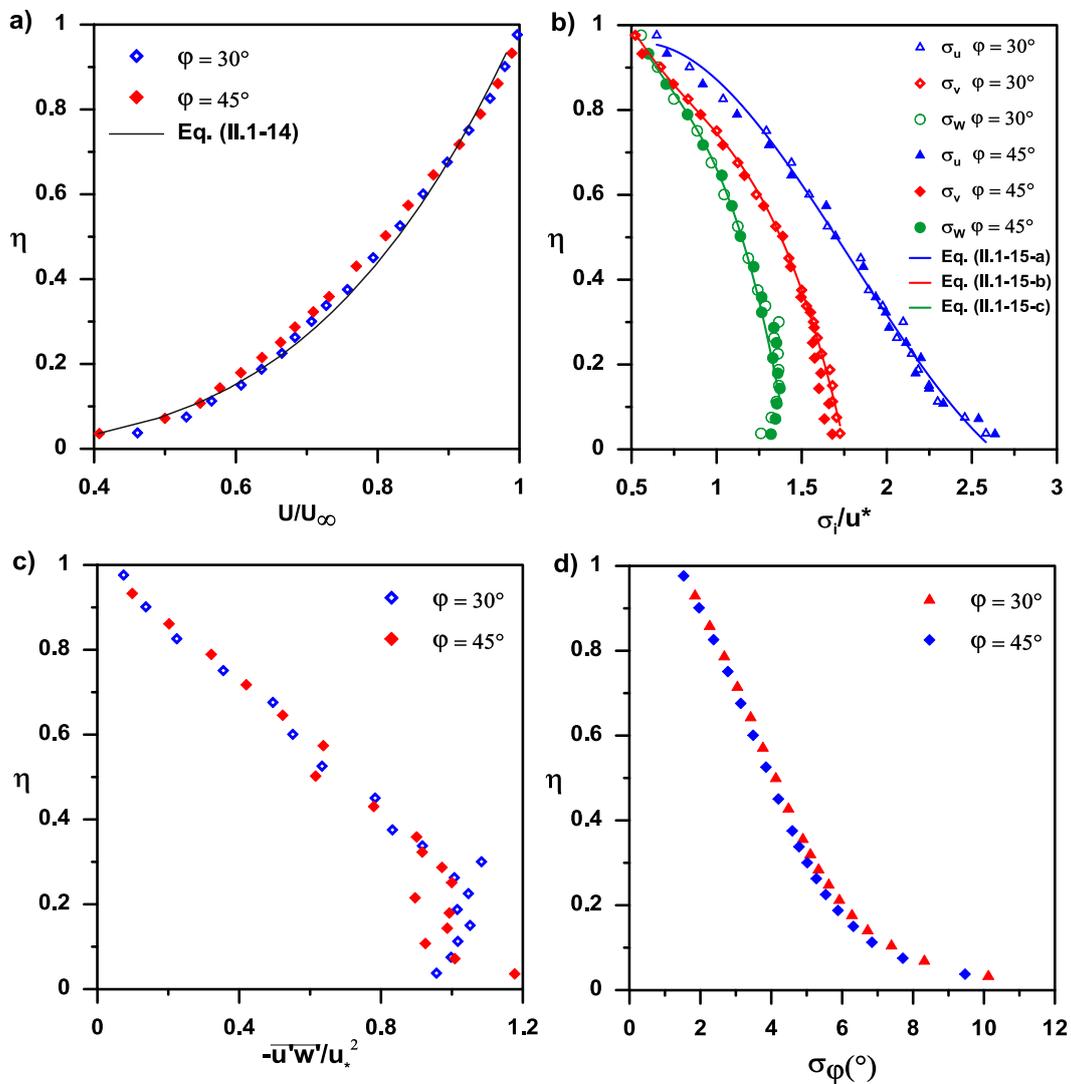


Figure II.3: Experimental characterisation of the turbulent boundary layer above the idealised urban canopy. Vertical profiles of (a) mean longitudinal velocity, (b) standard deviation of the three velocity components, (c) Reynolds stress and (d) wind direction fluctuation.

Experiments were performed for different buildings configurations, obtained by varying the blocks spacing and the wind direction. In the present study we focus on a single configuration of obstacles, referred to as Configuration 1 by Garbero et al. (2010b), with regularly spaced buildings forming streets of width  $W=H$ , and with a varying wind incident angle  $\varphi$ , defined as the angle between the direction of the incident wind and the  $x$ -axis of the array (Figure II.2).

Four different directions were tested:  $\varphi=2.5^\circ\pm 2.5^\circ$ ,  $\varphi=12.5^\circ\pm 2.5^\circ$ ,  $\varphi=27.5^\circ\pm 2.5^\circ$  and  $\varphi=47.5^\circ\pm 2.5^\circ$ . It is worth noting that in the experiments the wind direction could not be defined with accuracy higher than  $\pm 2.5^\circ$ . This was due to asymmetries in the flow produced in the wind tunnel and due to the interaction between the turbulence grid placed at the end of the convergent, the spires at the beginning of the test section and the canopy of squared blocks disposed on the tunnel floor. Reproducing a symmetric flow in a symmetric domain is a problem that the experimentalists often have to face. This can be handled relatively easily in wind tunnels with a reduced width (Barlow et al., 2004; Salizzoni et al., 2011; Simoëns and Wallace, 2008). However, slight departures from symmetry cannot always be avoided in wider wind tunnels, as that used for the experiments performed by Garbero et al. (2010b). An interesting analysis of the effects of these slight asymmetries on the flow within similar geometries is provided by Hoydysh and Dabberdt (1994), who observed unpredictable deviation of the pattern of a pollutant plume in a regular array of obstacles.

A source of a passive scalar  $Q$  was placed at a street intersection of coordinates  $X=Y=0$  and  $Z=H/2$ . Ethane was used as passive tracer and its concentration downwind the source was measured by means of a Flame Ionisation Detector. Concentration profiles were measured within and above the streets, at  $Z=H/2$  and  $Z=2H$ , for increasing distances from the source.

Above the urban canopy, a turbulent boundary layer takes place, with a depth  $\delta=0.8\text{m}$ , and a free stream velocity at that height  $U_\infty$  equal to  $5\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ . Vertical profiles of the velocity statistics are plotted on Figure II.3 in non-dimensional form as a function of the vertical coordinate. This is defined as  $\eta=(z-d)/(\delta-d)$ , being  $d$  the displacement height (Jackson, 1981), that in this particular case is  $d=H$  (Garbero et al., 2010b). The plots show that:

- Profiles of all statistics do not vary with the wind direction. As it was discussed by Garbero et al. (2010b), in the part of the test section within which dispersion experiments were performed, the velocity statistics can be considered as independent of the  $x$  and  $y$  coordinates (except very close to the top of the blocks, in the roughness sub-layer).
- Reynolds stress profiles are almost constant in the lower part of the velocity field, for  $0.02 \leq \eta \leq 0.35$  (Figure II.3-c). This allows us to properly estimate the friction velocity as:

$$u_* = \sqrt{-\overline{u'w'}} = 0.22 \pm 0.01 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1} \quad (\text{II.1-13})$$

- The variability of the wind direction  $\sigma_\varphi \simeq \frac{\sigma_v}{U}$ , varies significantly across the boundary layer and reaches its maximal value, of about  $12^\circ$ , at the canopy top.

The fact that the flow above the canopy does not depend on the wind direction implies that the contribution on the total drag exerted by the urban canopy on the atmospheric flow is mainly due to the effect of the small scale roughness elements over the roof of the blocks rather than on the orientation of the blocks. This confirms the experimental results of Salizzoni et al. (2008) on the influence of different roughness scales on the momentum transfer in an urban boundary layer over a

2D geometry, showing that, in skimming flow regime, the smaller scale roughness controls almost entirely the momentum transfer.

However, we stress here that the experimental results of Garbero et al. (2010b) show that the wind direction affects significantly the vertical mass flux per unit surface between canopy and overlying atmosphere, even though it does not alter the turbulent momentum transfer (Figure II.3-c). This was also confirmed by numerical results of Buccolieri et al. (2011) who studied the ventilation condition of this same urban canopy for varying wind directions by means of CFD RANS simulations, with a  $k-\varepsilon$  turbulence closure model.

### II.1.5. Setting of the model parameters

In order to reduce as much as possible the uncertainty related to the modelling of flow and dispersion above roof level, we have imposed profiles of mean longitudinal velocity and of the standard deviations of the three velocity components that closely match the experimental data (Figure II.3). We have then investigated the response of the models output to modifications of the three main parameters governing the dispersion within the canopy: the advection velocity along the street axes  $U_{street}$ , the wind fluctuations on the horizontal plane at street intersections  $\sigma_\varphi$  and the canopy-atmosphere exchange velocity  $u_d$ . In what follows, we provide details on the parameterisations adopted for the external flow and we discuss the range of values over which each of the three parameters  $U_{street}$  (II.1.5.2.1),  $\sigma_\varphi$  (II.1.5.2.2) and  $u_d$  (II.1.5.2.3) has been varied.

#### II.1.5.1. Flow and dispersion above the roof level

As discussed in (II.3), the atmospheric flow above the urban canopy can reasonably be assumed as homogeneous in the horizontal plane. A reliable model for the mean longitudinal velocity is obtained by fitting the experimental data with a power-law of the form (Figure II.3-a)

$$\frac{U}{U_\infty} = \eta^n, \quad (II.1-14)$$

With  $n=0.27$ . Similarly, the profiles of the standard deviations (Figure II.3-b) of the longitudinal  $\sigma_u$  (in the  $x$ -direction), transversal  $\sigma_v$  (in the  $y$ -direction) and vertical  $\sigma_w$  (in the  $z$ -direction) velocities are well fitted by 3<sup>rd</sup> order polynomials (for completeness, we report here also the profile for  $\sigma_u$ , even though it will not be used in the dispersion model):

$$\begin{cases} \sigma_u = 2.44u_* (1 + 0.68\eta + 0.67\eta^2 - 0.67\eta^3) & (a) \\ \sigma_v = 1.66u_* (1 - 0.15\eta - 0.120\eta^2 - 0.38\eta^3) & (b) \\ \sigma_w = 1.2u_* (1 + 0.96\eta - 2\eta^2 + 0.4\eta^3) & (c) \end{cases} \quad (II.1-15)$$

Pollutant dispersion is simulated by means of a Gaussian plume model (eq. (II.1-1)). In this model, the plume centre of mass is advected by the mean longitudinal velocity given by equation (II.1-14), and the transversal and vertical spreads  $\sigma_y$  and  $\sigma_z$  are computed as

$$\begin{cases} \sigma_y(t) = \frac{\sigma_v t}{\sqrt{1 + \frac{t}{2T_{L,y}}}} & (a) \\ \sigma_z(t) = \frac{\sigma_w t}{\sqrt{1 + \frac{t}{2T_{L,z}}}} & (b) \end{cases} \quad (II.1-16)$$

where  $T_{L,y}$  and  $T_{L,z}$  are the Lagrangian time scales and the flight time is computed as  $t = x/U_p$ , being  $x$  the distance from the source. As it is customary, the Lagrangian time scales  $T_{L,y}$  and  $T_{L,z}$  are estimated by means of the following relations (Nieuwstadt et Van Dop, 1982):

$$\begin{cases} T_{L,y} = \frac{2\sigma_v^2}{C_0\varepsilon} & \text{(a)} \\ T_{L,z} = \frac{2\sigma_w^2}{C_0\varepsilon} & \text{(b)} \end{cases} \quad (\text{II.1-17})$$

where  $C_0=4.5$  is the Kolmogorov constant and  $\varepsilon$  is the turbulent kinetic energy dissipation rate, that is modelled as  $\varepsilon = u_*^3/\kappa z$ , therefore assuming a local equilibrium between production and dissipation of the turbulent kinetic energy.

### II.1.5.2. Urban canopy

#### II.1.5.2.1. Velocity within the street canyon

The model for the spatially averaged velocity within the street (Soulhac et al. 2008) implemented in SIRANE refers to the case of an infinite street (II.1.3.2.2), and leads to a mean velocity (averaged over the street section) proportional to the cosine of the external wind direction (eq.(II.1-3)). However, Soulhac et al. (2009) point out that this dependence is significantly modified in the case of a street of finite length, namely with  $L=5H$  (Figure II.4). The presence of a vortex with a vertical axis close to the street intersections induce lower velocities within the street, compared to those in an infinite one. In order to take into account these effects, we introduce an empirical correction of equation (II.1-3) that fit the numerical results of Soulhac et al. (2009):

$$\frac{U_{street}}{U_{street,\varphi=0^\circ}} = \cos(\varphi) \cdot f(\varphi), \quad (\text{II.1-18})$$

where:

$$\begin{cases} f(\varphi) = 1 + \alpha \frac{\varphi}{\pi} \left( \frac{\varphi}{\pi} - \frac{1}{2} \right) & \text{for } 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2} \\ f(\varphi) = f(\pi - \varphi) = f(-\varphi) & \text{for } \varphi \notin \left[ 0, \frac{\pi}{2} \right] \end{cases} \quad (\text{II.1-19})$$

with  $\alpha=6.4$ . In order to test the influence of these effects on the accuracy of the results we have tested two different cases: the case of  $U_{street}$  evolving as predicted by equation (II.1-3), for an infinite street, and the case of  $U_{street}$  evolving as predicted by equation (II.1-18).

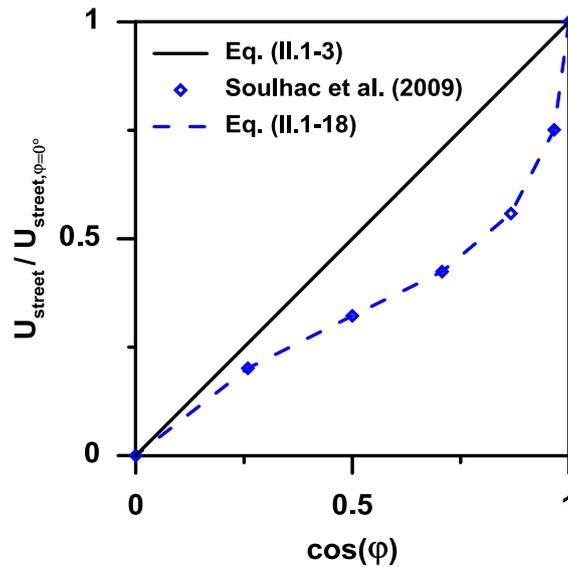


Figure II.4: Spatially averaged velocity within a street canyon as a function of the wind direction. Comparison between the model for an infinite street (eq. (II.1-3)), the numerical estimates in a finite street by Soulhac et al. (2009) and the corresponding empirical model (eq. (II.1-18)).

#### II.1.5.2.2. Horizontal wind fluctuations

The mass exchanges at a street intersection are controlled by its geometry, by the wind direction and by its fluctuation  $\sigma_\varphi$  in the horizontal plane. The intensity of this fluctuation within urban intersections is hardly predictable theoretically, and can be thought as a result of a high number of factors.

Figure II.3-d shows the high variability of  $\sigma_\varphi$  throughout the whole boundary layer, with a maximal value reached at roof level and slightly exceeding  $10^\circ$ . Since no further information is generally available within the urban canopy, the value of at roof height is the one adopted as a reference value in SIRANE (in this case  $\sigma_\varphi = 12^\circ$ ). The reliability of this reference value however, has never been tested nor discussed.

The question is whether and how  $\sigma_\varphi$  is modified within the canopy as a function of the wind direction and of the geometry of the intersection. On one side, the flow channelling along the street axes may inhibit the wind fluctuation on the horizontal plane. On the other, these may be enhanced by locally generated instabilities due to the high shear taking place within street intersections. The role of these two opposite factors can vary significantly with the wind direction and make the value of  $\sigma_\varphi$  difficult to predict 'a priori'. Given this high uncertainty, we have decided to investigate the response of the model to a wide range of values, i.e.  $5^\circ < \sigma_\varphi < 50^\circ$ .

#### II.1.5.2.3. Vertical exchange velocity $u_d$

In SIRANE, the estimate of  $u_d$  provided by equation (II.1-12) is obtained by means of a theoretical model developed for a 2D canyon (Soulhac et al., 2013). The question is whether the estimate provided by equation (II.1-12) can be transposed to more complex 3D geometries, within which the flow patterns exhibit higher complexity rather than within a 2D canyon. These are characterized by the presence of vortex with vertical axis taking place at the street edges, which induces mean advective air (and eventually pollutant) fluxes from the canopy to the external atmospheric flow (Soulhac et al., 2009). In these conditions we may expect  $u_d$  to depend on various geometrical parameters, as the street aspect ratios and the wind direction.

The role of the aspect ratio was tackled in several numerical and experimental studies (Barlow et al., 2004; Gromke and Ruck, 2012; Murena et al., 2011; Salizzoni, 2006). Conversely, as far as we are aware, very few studies investigated the role of the wind direction. As an example Moonen et al. (2011) performed a numerical study on an isolate canyon with square section and varying length  $L$ , and showed that this dependency could give rise to significant variations (of order 50%) of  $u_d$  depending on its geometry.

In the configuration we are considering, the value of  $\sigma_w$  close to the roof level is  $1.2u_*$  (see Figure II.3-b). According to equation (II.1-12), the reference value of the exchange velocity (normalised by the friction velocity) as computed by SIRANE is  $u_d/u_* = 0.27$ . For each wind direction, we will investigate the response of the model to the variation of  $u_d/u_*$  between 0.2, a lower bound assumed as representative of a 2D canyon (Salizzoni et al., 2009), and 0.6.

### II.1.6. Results

As mentioned in (II.1.4), the experimental estimate of the wind direction were affected by an error of  $\pm 2.5^\circ$ . To identify the effective wind direction to impose subsequently in the sensitivity analysis, we have performed three simulations for each nominal wind direction, i.e.  $\varphi = 2.5^\circ \pm 2.5^\circ$ ,  $\varphi = 12.5^\circ \pm 2.5^\circ$ ,  $\varphi = 27.5^\circ \pm 2.5^\circ$  and  $\varphi = 45^\circ \pm 2.5^\circ$ , that were run with the reference parameterisations of SIRANE. The optimal angle was somehow easy to identify, by observing the trajectory of the simulated plume centre of mass below and above the roof level and comparing that to that obtained from the experimental concentration profiles. As observed by Garbero et al. (2010), these two trajectory do not coincide and do not necessarily match the wind direction  $\varphi$ . Their proper simulation is therefore a prerogative of a street network model, that is actually able to simulate the decoupling between the two, compared to other operational dispersion models, e.g. modified Gaussian models (Carruthers et al., 1994; Di Sabatino et al., 2013), that actually do not. With this criterion we could identify the four effective wind direction as  $\varphi = 2.5^\circ$ ,  $\varphi = 10^\circ$ ,  $\varphi = 25^\circ$  and  $\varphi = 45^\circ$ .

For these wind directions, we have then investigated the performances of the model depending on the parameterisation adopted for  $U_{street}$  and on the values of  $\sigma_\varphi$  and  $u_d$ . For each simulation we have compared the set of the numerical results to the experimental data, consisting in transversal profiles of mean concentration registered within the obstacle array ( $Z=H/2$ ) and above it ( $Z=2H$ ).

In order to quantify the agreement between simulations and experiments, we have taken into account three statistical parameters, as it is customary in the recent literature (Chang and Hanna, 2004). These are the correlation coefficient  $R$ , the fractional bias  $FB$  and the normal mean square error  $NMSE$ , defined as:

$$R = \frac{(\overline{C_p^* - C_p^*})(\overline{C_m^* - C_m^*})}{\sqrt{(\overline{C_p^* - C_p^*})^2 (\overline{C_m^* - C_m^*})^2}} \quad (II.1-20)$$

$$FB = \frac{\overline{C_p^* - C_m^*}}{\frac{1}{2}(\overline{C_p^* + C_m^*})} \quad (II.1-21)$$

$$NMSE = \frac{(\overline{C_p^* - C_m^*})^2}{\overline{C_p^*} \overline{C_m^*}}, \quad (II.1-22)$$

where  $C_p^*$  is the non-dimensional averaged concentration predicted by SIRANE and  $C_m^*$  is that measured in the experiments. Concentration are made dimensionless by dividing them by the concentration scale  $\Delta C = Q / (U_\infty \delta^2)$ .

Firstly, we present a detailed overview of what we refer as the ‘optimal’ simulations (II.1.6.1). For the reasons that will be made clearer in (II.1.6.3), we have chosen to define as ‘optimal’ the simulations minimizing the *NMSE*. We compare these to the case of a simulation obtained imposing the reference set of parameters in SIRANE. This latter will be referred to as the ‘reference’ simulation.

To show the sensitivity to the model parameters we then refer to this data set and vary one parameter at the time. We first evidence the role of  $U_{street}$  (II.1.6.2). We then explore the model response in the space of two parameters,  $\sigma_\varphi$  et  $u_d$  (II.1.6.3). Finally we discuss the role of the choice of the statistical criteria adopted in our analysis (II.1.6.4).

### II.1.6.1. The optimal simulations

In Table II.1 is reported the set of parameters used as a ‘reference’ in SIRANE and that providing the best agreement between model and experiments, referred to as ‘optimal’. For both set of parameters we report the corresponding values of the statistical indices.

	$\varphi=2.5^\circ$		$\varphi=10^\circ$		$\varphi=25^\circ$		$\varphi=45^\circ$	
	Ref.	Opt.	Ref.	Opt.	Ref.	Opt.	Ref.	Opt.
$U_{street}$	Eq. (II.1-3)	Eq. (II.1-18)	Eq. (II.1-3)	Eq. (II.1-18)	Eq. (II.1-3)	Eq. (II.1-18)	Eq. (II.1-3)	Eq. (II.1-18)
$\sigma_\varphi$	12°	15°	12°	15°	12°	30°	12°	30°
$u_d/u_*$	0.27	0.3	0.27	0.35	0.27	0.25	0.27	0.55
$R$	0.90	0.95	0.90	0.91	0.83	0.87	0.89	0.92
$FB$	0.07	0.02	0.23	0.11	0.17	0.24	0.68	0.34
$NMSE$	0.16	0.15	0.18	0.16	0.33	0.25	1.08	0.35

Table II.1: Set of the parameters of the ‘optimal’ simulation (minimizing the *NMSE*) and of the ‘reference’ simulation and values of the corresponding statistical indices.

Table II.1 shows that the model provides better results adopting a model for the advection velocity  $U_{street}$  given by equation (II.1-18), rather than (II.1-3), therefore including the empirical correction to take account for the street border effects on the velocity field within it. The wind direction variability  $\sigma_\varphi$  is very close to the reference value ( $\sigma_\varphi = 12^\circ$ ) for  $\varphi = 2.5^\circ$  and  $10^\circ$  and tends to increase with the wind direction  $\varphi$ . Considering the vertical exchange, for most of the considered wind directions, i.e.  $\varphi = 2.5^\circ, 10^\circ$  and  $25^\circ$ , the optimal value of  $u_d/u_*$  is close to the reference value  $u_d/u_* \approx 0.27$  given by the theoretical model implemented in SIRANE. Significant discrepancies between the optimal and the reference values are only observed for  $\varphi = 45^\circ$ . In this latter case the best agreement with the experiments is attained by increasing the exchange velocity up to  $u_d/u_* \approx 0.55$ .

According to the standards proposed by Chang and Hanna (2004) for the evaluation of the quality of a dispersion model, i.e.  $|FB| \leq 0.3$  and  $|NMSE| \leq 1.5$ , the model results are good, both for the reference and the optimal cases. The only exception is observed in the value of  $FB$  for  $\varphi = 45^\circ$ , that slightly exceeds the limits. Even the values of the correlation coefficient  $R$  witness the reliability of the model in simulating the dispersion process.

Before going into details discussing the sensitivity to each parameter, we give a general overview of the comparison between modelled and experimental mean concentration for these optimal simulations. Transversal profiles at different distances from the source within ( $z=H/2$ ) and above ( $z=2H$ ) the simulated urban canopy are shown in Figure II.5-a and Figure II.5-b ( $\varphi=2.5^\circ$ ), Figure II.6-a and Figure II.6-b ( $\varphi=10^\circ$ ), Figure II.7-a and Figure II.7-b ( $\varphi=25^\circ$ ) and Figure II.8-a and Figure II.8-b ( $\varphi=45^\circ$ ).

In a general way, the model predictions agree better with the experiments above the canopy (Figures II.5-a, II.6-a, II.7-a and II.8-a) rather than within it. This is due to two main reasons. Firstly, first and second order statistics of the external flow have been imposed in order to match as much as possible those measured in the experiments (II.1.4), whereas the flow within the canopy is fully parameterised (II.1.5.2). Secondly, it has to be kept in mind that the model is conceived to estimate spatially averaged concentrations within the streets only, and that therefore limits its ability in predicting concentration variation within each street.

These limitations are particularly evident for low wind incident angles, i.e.  $\varphi=2.5^\circ$  (Figure II.5-b). In this case the plume is almost completely confined within the street where it has been emitted. Tiny turbulent fluxes at street intersections induce a pollutant transfer towards the lateral streets. This is almost completely due to the turbulent component, and therefore regulated by  $\sigma_\varphi$  in the model. In these configurations, in the transversal streets the vertical exchange velocity is significantly higher than the advective velocity along the street axes i.e.  $U_{street} \ll U_d$ . Therefore, the concentration patterns result in high gradients within the transversal street and an evident decay of the concentration for increasing distances from the intersection.

Since the model cannot simulate concentration gradients within the streets, these low angle configuration represents a critical condition for the box-model approach, which are made evident by the differences in the peak concentrations within the canopy reported in Figure II.5-c. However, the dispersion plot in Figure II.5-d and the statistical indices (Table II.1) show an overall good agreement between model and experiments. In particular, we observe an excellent agreement in the concentration profiles above the canopy. As observed by Garbero et al. (2010), the lateral plume spread above the canopy in this configuration are even lower than those observed in 'open terrain'. This reflects the reduced plume spread within the array, which is constrained by its channeling in the street where it has been emitted. Therefore this good agreement has to be interpreted as a further proof of the ability of the model in reproducing the main mass transfer mechanisms governing the pollutant dispersion at the district scale.

In a general way, the considerations exposed for the case  $\varphi=2.5^\circ$  hold for the case  $\varphi=10^\circ$ . The model reproduces quite accurately the experimental distribution of mean concentrations, both above the array (Figure II.6-a) and within it (Figure II.6-b). The main errors are related to the predictions of the peak concentration along the street where the plume is mainly channelled (Figure II.6-c). Despite these errors, the overall accordance presented by the scatter plot is of good quality, as evidenced by the slope of the linear regression and of the relative  $R$  coefficient.

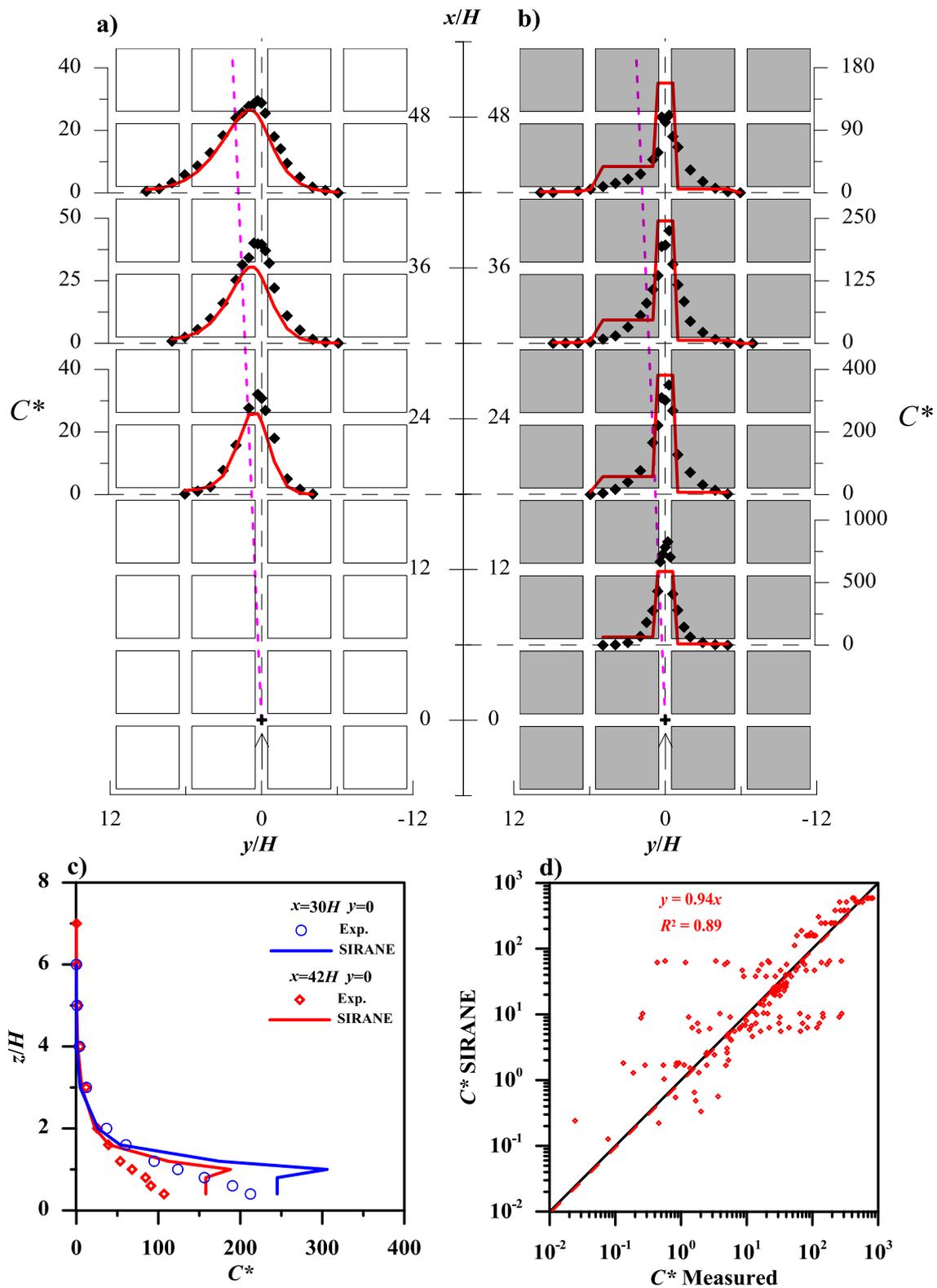


Figure II.5: Plume behaviour throughout the array for  $\phi = 2.5^\circ$ . Comparison between experimental (black dots) and numerical (red line) results for varying distance from the source position (+), above the canopy ( $z = 2H$ ) (a) and within it ( $z = H/2$ ) (b). Comparison between the experimental vertical profiles (symbols) and the numerical results (lines) at different distances from the source (c). Scatter plots comparing the concentrations predicted by SIRANE with the all wind tunnel data (d).  
 « The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

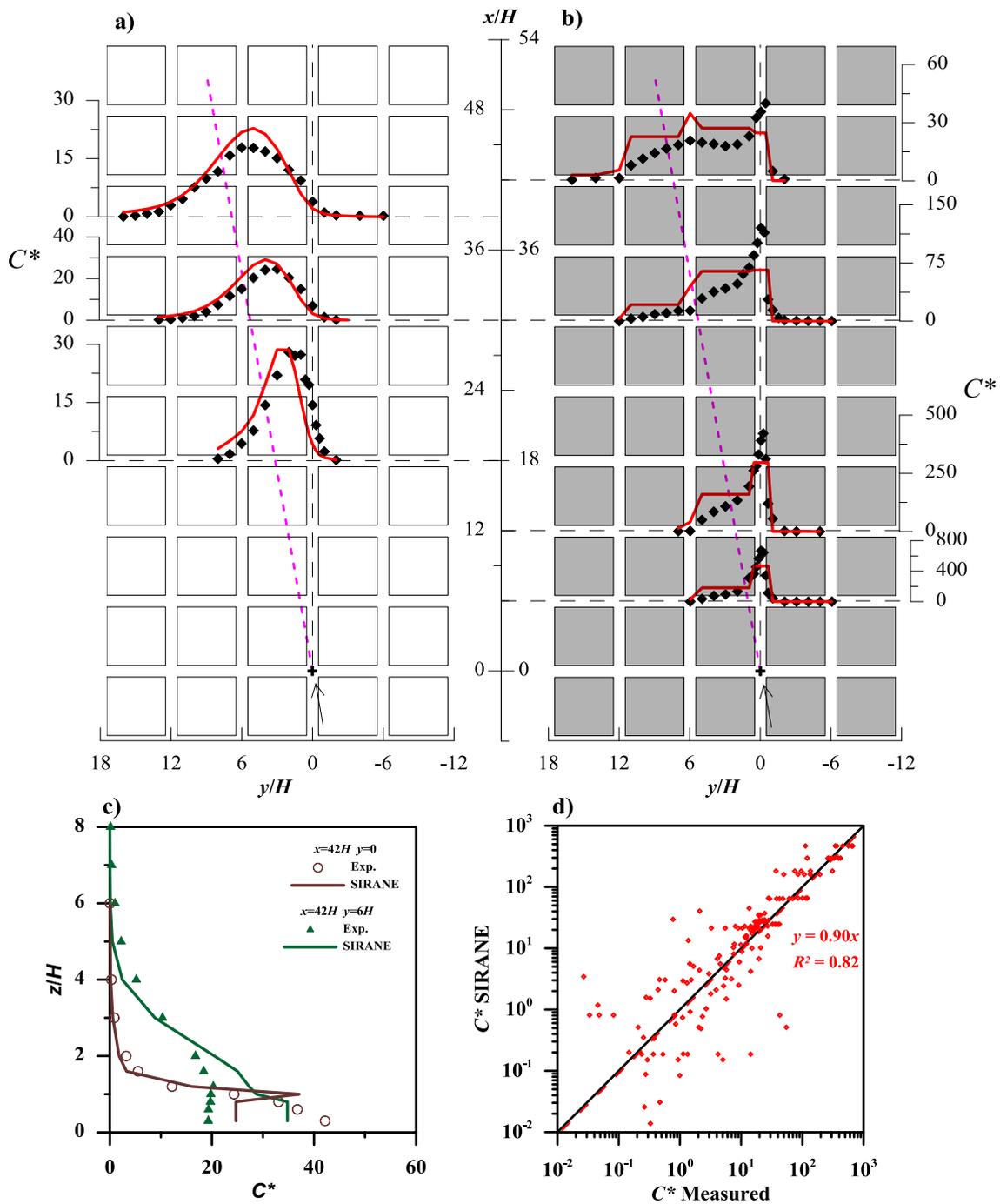


Figure II.6 :Plume behaviour throughout the array for  $\varphi=10^\circ$ . Comparison between experimental (black dots) and numerical (red line) results for varying distance from the source position (+), above the canopy ( $z=2H$ ) (a) and within it ( $z=H/2$ ) (b). Comparison between the experimental vertical profiles (symbols) and the numerical results (lines) at different distances from the source (c). Scatter plots comparing the concentrations predicted by SIRANE with the all wind tunnel data (d).

« The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

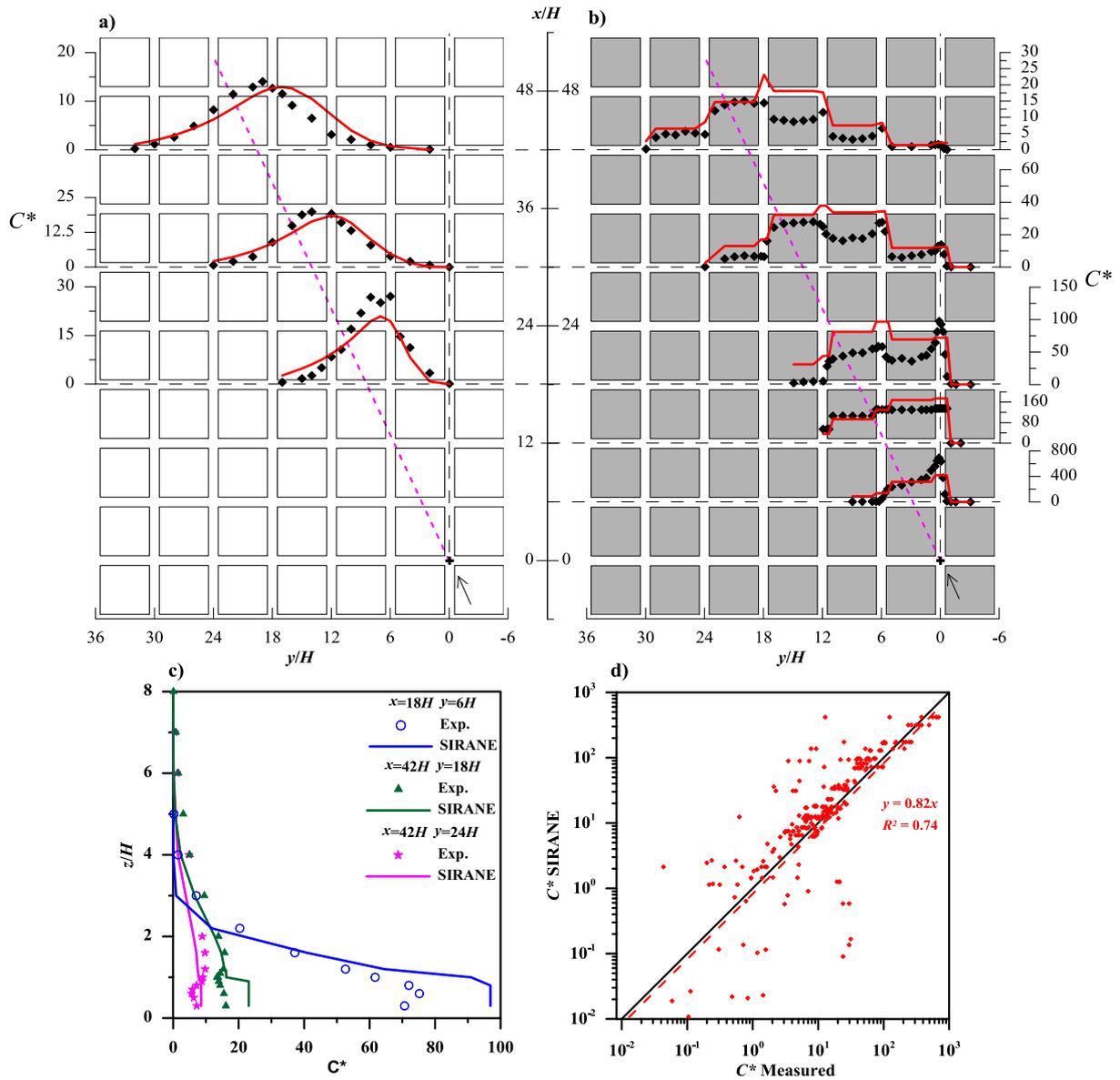


Figure II.7: Plume behaviour throughout the array for  $\phi=25^\circ$ . Comparison between experimental (black dots) and numerical (red line) results for varying distance from the source position (+), above the canopy ( $z=2H$ ) (a) and within it ( $z=H/2$ ) (b). Comparison between the experimental vertical profiles (symbols) and the numerical results (lines) at different distances from the source (c). Scatter plots comparing the concentrations predicted by SIRANE with the all wind tunnel data (d).  
 « The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

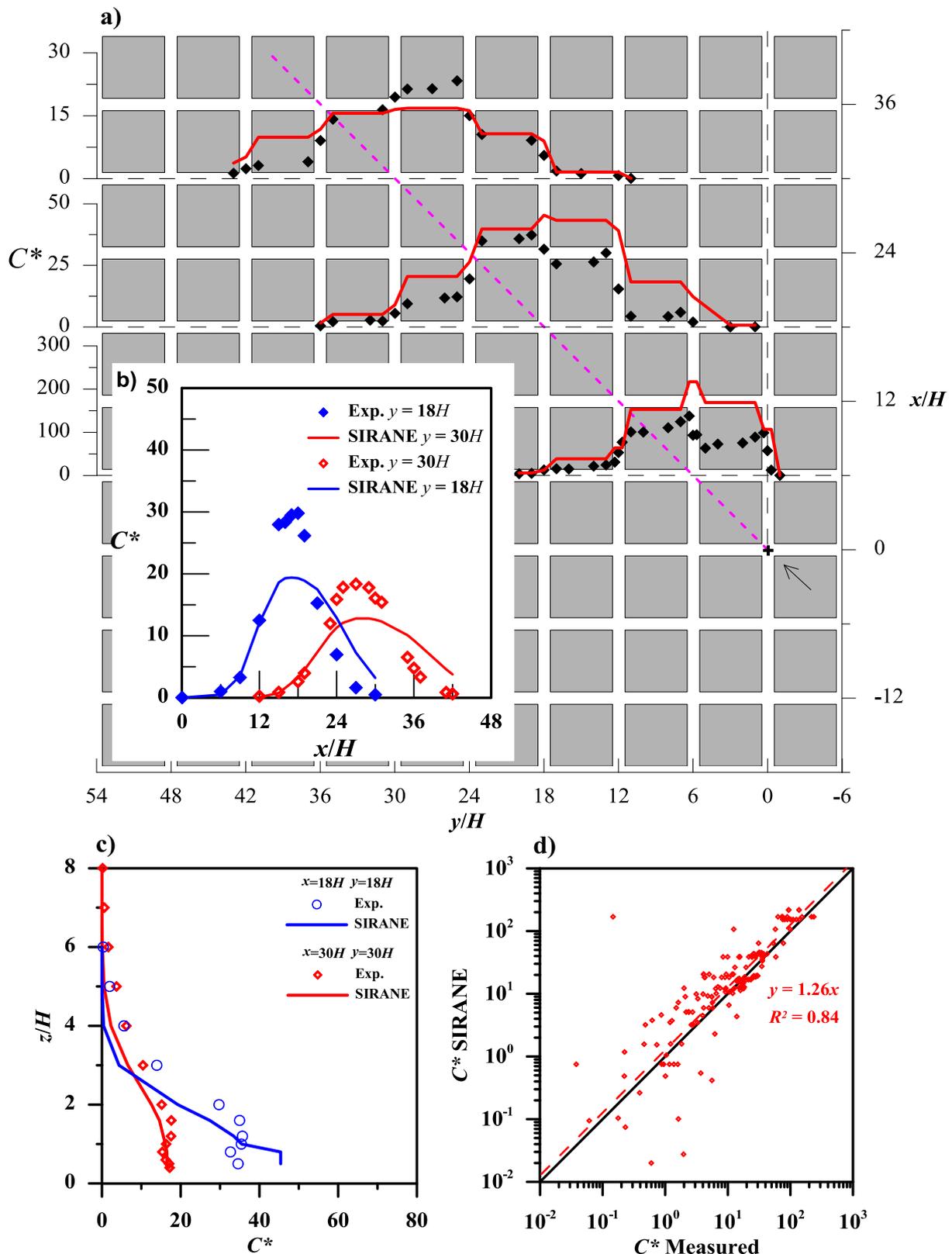


Figure II.8 : Plume behaviour throughout the array for  $\varphi=45^\circ$ . Comparison between experimental (black dots) and numerical (red line) results for varying distance from the source position (+), above the canopy ( $z=2H$ ) (a) and within it ( $z=H/2$ ) (b). Comparison between the experimental vertical profiles (symbols) and the numerical results (lines) at different distances from the source (c). Scatter plots comparing the concentrations predicted by SIRANE with the all wind tunnel data (d). « The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

As  $\varphi$  increases ( $\varphi = 25^\circ$  and  $\varphi = 45^\circ$ ), the advective transfer along the axes of the lateral streets becomes more effective and its intensity overwhelms that of the vertical transfer, i.e.  $U_{street} \gg u_d$ . This results in almost uniform concentrations within the streets and steep variations at the intersections. It is worth noting that such a spatial distribution of the mean concentration within the canopy is qualitatively in agreement with that given by SIRANE (II.1.3). This experimental evidence therefore can be assumed as a proof of the validity of the approach implemented in the street network model, that reduces the high complexity of the dispersion within the canopy to the parameterisation of three main transfer phenomena only (II.1.3.2).

Even though the differences between numerical and experimental results can be locally significant, the model reproduces generally well the horizontal profiles of the mean concentration above the street network (Figure II.7-a and Figure II.8-a) and within it (Figure II.7-b and Figure II.8-b), as well as their vertical evolution (Figure II.7-c and Figure II.8-c). This general good agreement is confirmed by the scatter plots (Figure II.7-d and Figure II.8-d) and by the slope and  $R$  coefficient provided by the relative linear regressions. In the case  $\varphi = 45^\circ$  however, results are worse than for lower angles. The values of the  $FB$  in the optimal simulation slightly exceed the targets ( $\leq 0.3$ ) and, differently than before, the model predictions above roof level exhibit non-negligible underestimates of the peak values.

### II.1.6.2. Dependence on the model for $U_{street}$

As mentioned in the previous paragraph, the model provides systematically better results adopting a model for the advective velocity  $U_{street}$  given by equation (II.1-18), which incorporates the empirical correction induced by the effects of the borders of a street of 'finite length', rather than with equation (II.1-3), that assumes a street of infinite length.

$U_{street}$	Eq. (II.1-3)	Eq. (II.1-18)
$\sigma_\varphi$	$30^\circ$	$30^\circ$
$u_d/u_*$	0.25	0.25
$R$	0.82	0.87
$FB$	0.10	0.24
$NMSE$	0.41	0.25

Table II.2: Influence of the model for  $U_{street}$  on the performances of the model for  $\varphi = 25^\circ$ . Value for  $\sigma_\varphi$  and  $u_d/u_*$  are those of the optimal simulation.

In order to enlighten the influence of the parameterisations adopted for  $U_{street}$  we compare the results provided by varying only the model for  $U_{street}$ , i.e. for street of finite (Eq. (II.1-18)) and infinite length (Eq. (II.1-3)). The other parameters are kept unaltered and are those set in the optimal simulation. We focus here on the case  $\varphi = 25^\circ$  (Figure II.9), since for this angle we have the highest gap between the estimates of  $U_{street}$  given by the two models (Figure II.4). Equation (II.1-3) always predicts higher  $U_{street}$  and therefore a more efficient mass transfer along the canyon axes. Adopting equation (II.1-3), rather than equation (II.1-18), we have therefore enhanced the effectiveness of the horizontal transfer within the canopy compared to the vertical transfer canopy/atmosphere, which is the same in the two cases. In these conditions, the canopy retains higher pollutant quantities within it. It is therefore not surprising that the resulting concentrations within the streets (and intersections) are systematically higher adopting equation (II.1-3) (Figure II.9-b), and that, at the same time, the concentration above the roof are reduced (Figure II.9-a).

However, it is worth noting that these effects are hardly detectable in the near field within the canopy (Figure II.9-b) and that these induce only relatively small variations in the street concentrations further on. As a result, the parameters related to the linear regression (Figure II.9-d), as well as the other statistical indices (Table II.2) vary only slightly.

These results show that, in a first approximation, the model proposed by Soulhac et al. (2008) for an infinite street constitutes a very good approximation of the advective transfer along the street axes within the canopy. Further analyses are needed to test the accuracy of the model in networks with varying street aspect ratios and less regular geometries.

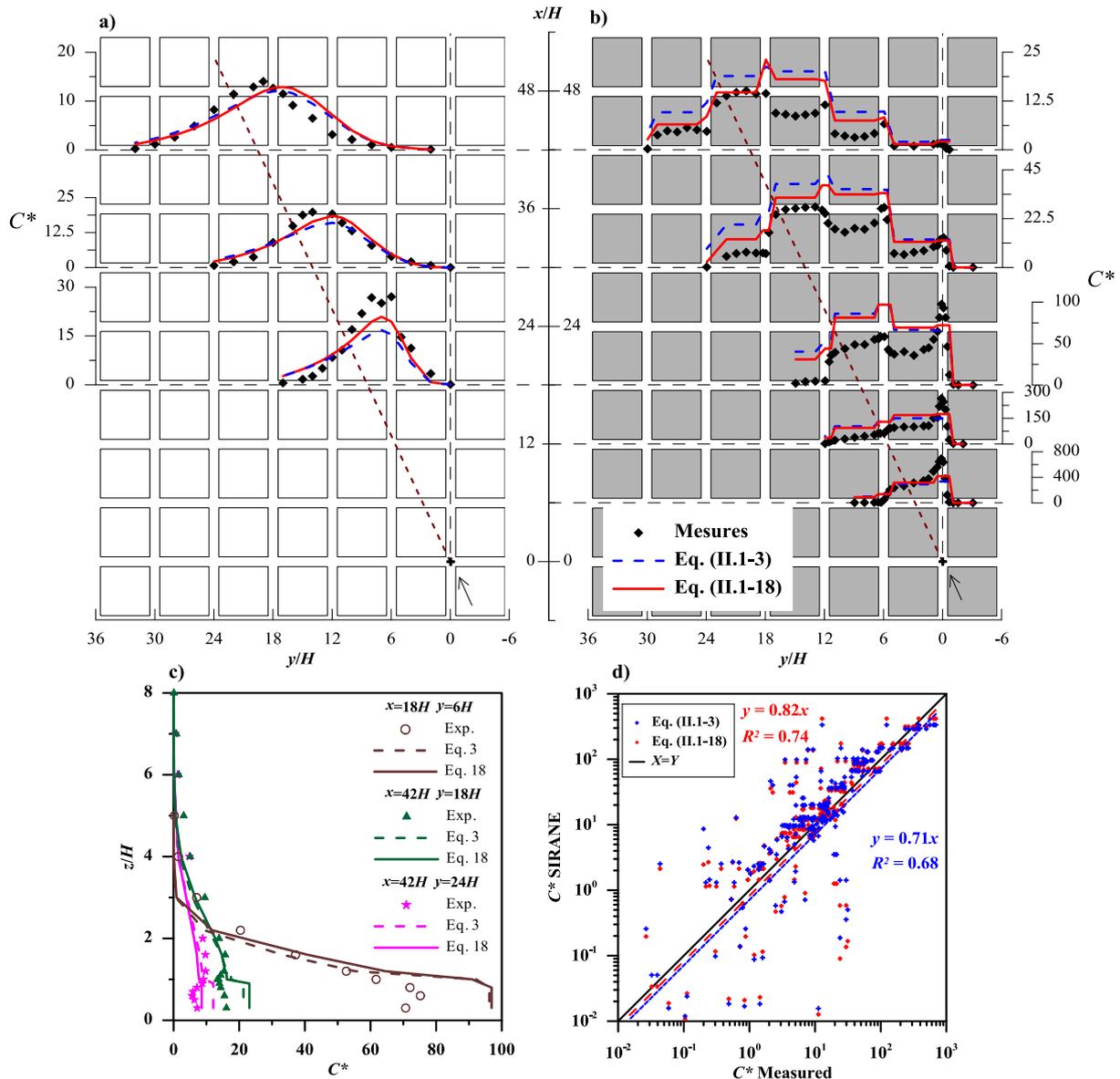


Figure II.9: Influence of the model for  $U_{street}$ , the mean advective velocity along the street axes for  $\varphi=25^\circ$ . Comparison of the model results obtained adopting equation (II.1-3) and equation (II.1-18), and keeping unaltered all other model parameters.

« The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

### II.1.6.3. Sensitivity to variations of $u_d$ and $\sigma_\varphi$

In order to have an overview of the influence of the two other parameters governing the dispersion process within the network, we have mapped the values of the statistical indices  $R$ ,  $FB$  and  $NMSE$  in the space of parameters  $u_d/u^*$  et  $\sigma_\varphi$ . Iso-contours of  $R$ ,  $FB$  and  $NMSE$  are plotted on Figure

II.10, for the four different directions  $2.5^\circ$ ,  $10^\circ$ ,  $25^\circ$ ,  $45^\circ$  (results refer to simulation with  $U_{street}$  given by equation (II.1-18)). We have varied  $u_d/u_*$  in the range  $0.2 - 0.6$  and  $\sigma_\varphi$  in the range  $5^\circ - 50^\circ$ . In the maps we can clearly identify couples of values of  $u_d/u_*$  and  $\sigma_\varphi$  maximizing  $R$  and minimizing  $NMSE$ . The values of  $u_d/u_*$  giving a maximal  $R$  and a minimal  $NMSE$ , differ only slightly for  $\varphi = 10^\circ$ . Even for  $\sigma_\varphi$ , optimal values provided by  $R$  and  $NMSE$  maps are very similar, except for the case  $\varphi = 45^\circ$ . In this latter case,  $R$  map provide an optimal value around  $\sigma_\varphi = 10^\circ - 15^\circ$ , which represents the minimal values for  $\sigma_\varphi$  observed in the four cases analysed.

Since we cannot identify any valid physical explanations to justify a lowest  $\sigma_\varphi$  for the highest wind direction, we interpret this maximum in the  $R$  plot as a numerical artefact rather than as an element with a physical significance. We have therefore chosen the best performances of the model (indicated in Table II.1), as those corresponding to the minima in the  $NMSE$  maps, since these provided values whose evolution could be coherently interpreted physically.

Optimal values of  $u_d/u_*$  vary around  $0.3 \pm 0.5$  for  $\varphi = 2.5^\circ$ ,  $\varphi = 10^\circ$  and  $\varphi = 25^\circ$ . These are very close to the estimate provided by equation (II.1-10) in SIRANE,  $u_d/u_* = 0.27$ , and to those by Bentham and Britter (2003), i.e.  $u_d/u_* = 0.3$ . A significant departure from this reference value is observed for  $\varphi = 45^\circ$ , for which the optimal value attains  $u_d/u_* = 0.55$ . Of course, this finding does not necessarily mean that  $u_d/u_* = 0.55$  is the actual bulk exchange velocity. An enhanced vertical mass transfer for increasing  $\varphi$  was however also observed by Buccolieri et al. (2011) in the same array, by means of RANS simulations. All these results suggest that  $u_d/u_*$  may exhibit significant variation as the wind direction exceeds  $25^\circ$  and shows the need for further studies aiming in direct estimates of  $u_d/u_*$  by means of numerical simulations or wind tunnel experiments. In all cases, these values are systematically higher than the reference value of  $0.2$  given by Salizzoni et al. (2009) for a 2D canyon. We stress here that, for each wind direction  $\varphi$ , simulations are performed adopting a single  $u_d/u_*$  for the whole street network, which then represents a spatially averaged exchange velocity at the canopy top. However, for half of the streets of the network, the wind direction (with respect to their axes) is actually  $\varphi$ , but for the other half the incident wind angle is  $\pi/2 - \varphi$ . Further improvement of the model performances may be therefore expected by a finer angular dependence of  $u_d/u_*$ .

However, it is worth noting that, according to the values of  $NMSE$ , all the results obtained with the present version of SIRANE for the investigated couples of  $u_d/u_*$  and  $\sigma_\varphi$  are lower than the limits indicated by Chang and Hanna (2004) for a satisfactory model.

The optimal values of  $\sigma_\varphi$  in the  $NMSE$  maps are  $\sigma_\varphi = 15^\circ$  for  $\varphi = 2.5^\circ$  and  $\varphi = 10^\circ$  and  $\sigma_\varphi = 30^\circ$  for  $\varphi = 25^\circ$  and  $\varphi = 45^\circ$ . It is worth noting that for  $\varphi = 2.5^\circ$  and  $\varphi = 10^\circ$  the optimal values are very close the reference value in SIRANE, i.e.  $\sigma_\varphi = 12^\circ$  (II.1.4.2), whereas these are systematically higher for larger angles.

Summarizing, results indicate a tendency for both  $u_d/u_*$  and  $\sigma_\varphi$  to attain a maximal value for  $\varphi = 45^\circ$ . Physically this can be related to the higher complexity of the flow streamlines close to and within street intersections, observed by means of RANS simulations by Soulhac et al. (2009). In these flow configurations the high interaction of the flows coming from different streets at streets intersection can reasonably induce higher mass fluxes within them, resulting therefore in higher  $\sigma_\varphi$ . At the same time, the vertical turbulent mass fluxes can be significantly enhanced by mean advective fluxes associated to vortex with vertical axis taking place close to intersection (Soulhac et al., 2009; Garbero et al., 2010) and that strongly interact with the flow in the intersection itself.

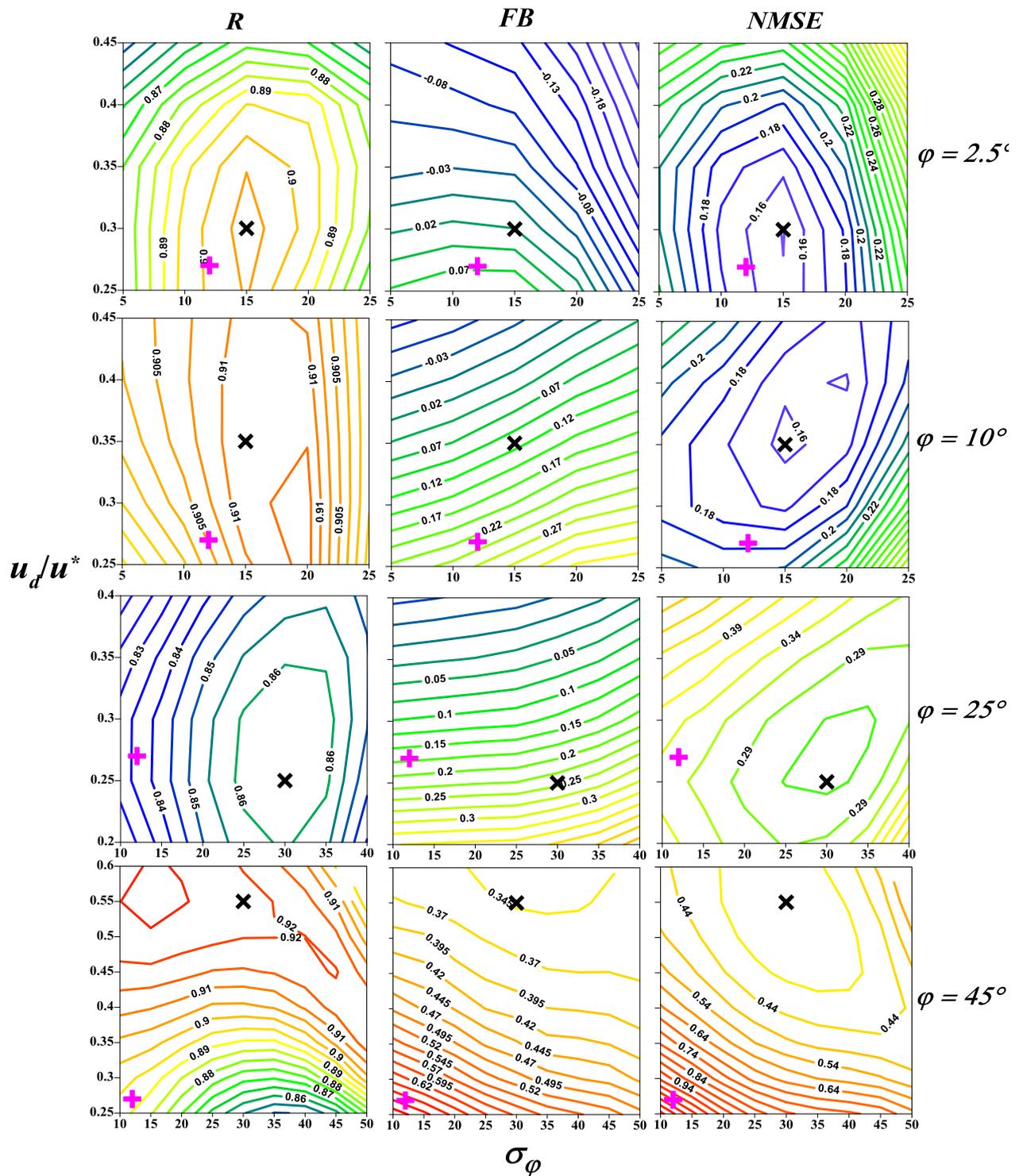


Figure II.10: Iso-contour of the correlation coefficient  $R$ , the fractional bias  $FB$  and the normal mean standard error  $NMSE$  in the plane  $(u_d/u^*, \sigma_\varphi)$  for different wind directions. Couples of  $u_d/u^*$ ,  $\sigma_\varphi$  minimising  $NMSE$  are indicated with a black cross. Reference values of  $SIRANE$  are indicated with red pluses.

### II.1.6.4. Discussion on reliability of the statistical indices

In Figure II.11 we have compared for the case  $\varphi = 10^\circ$  the results of the optimal simulation, provided by the couple of  $u_d/u_*$  and  $\sigma_\varphi$  (0.35 and  $15^\circ$ , respectively), and those obtained by slightly varying their values, i.e.  $u_d/u_* = 0.3$  and  $\sigma_\varphi = 20^\circ$ .

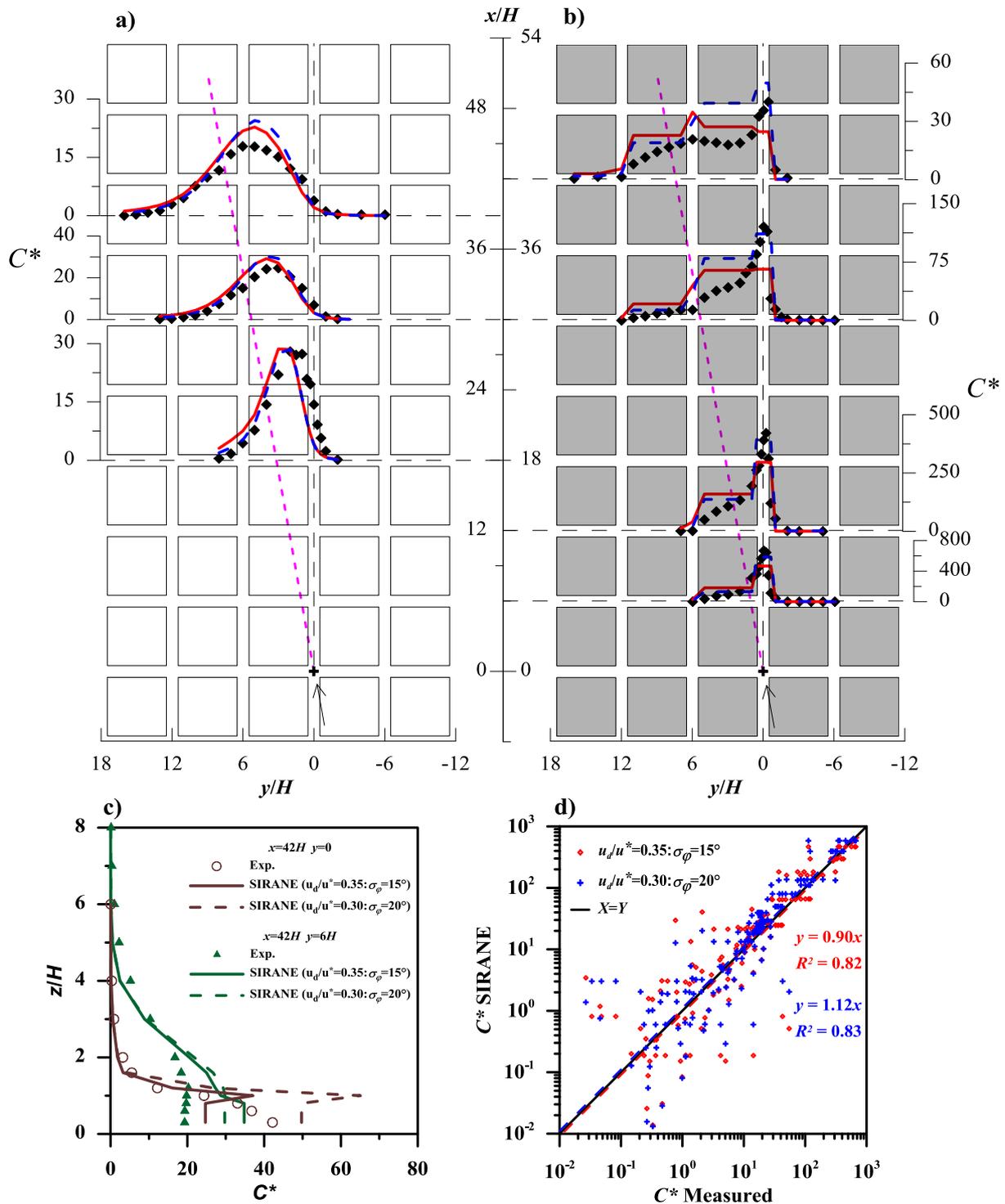


Figure II.11: Plume behaviour throughout the array for  $\varphi = 10^\circ$ . Comparison between the optimal simulation (blue continuous line), with  $u_d/u_* = 0.35$  and  $\sigma_\varphi = 15^\circ$ , and results obtained with  $u_d/u_* = 0.30$  and  $\sigma_\varphi = 20^\circ$  (red dotted line).

« The purple dotted curve indicates the external wind direction crossing the source »

Even though the external concentration are very similar (Figure II.11-a), in the latter case the model tends to overestimate pollutant concentrations within the canopy (Figure II.11-b-c-d), with a slight deterioration of the statistical indices (Table II.3). In these circumstances however, the model is shown to be able to better capture the concentration maxima at street intersections (Figure II.11-b-c) for all distances from the source. Therefore a validation of the model adopting only concentration registered at street intersections, would have led to a different conclusions in our analysis.

		Opt.
$U_{street}$	Eq. (II.1-18)	Eq. (II.1-18)
$\sigma_\varphi$	20°	15°
$u_d/u_*$	0.3	0.35
$R$	0.91	0.91
$FB$	0.24	0.11
$NMSE$	0.19	0.16

Table II.3: Influence of slight variations of the values of  $\sigma_\varphi$  and  $u_d/u_*$  on the model performances.

This simple example shows that the interpretation of the model performances with statistical criteria has to be adopted with caution, and that the adoption of a different experimental reference data set can bias the inferred performances of the model.

### II.1.7. Conclusion

We have examined the reliability of the parametric relations used to model pollutant transfer within an urban district by means of the SIRANE model that adopts a street network approach to simulate urban atmospheric dispersion. The results provided by the model have been systematically compared with the wind tunnel experiments of a plume dispersing within an idealised urban district (Garbero et al., 2010b). These experimental configurations were conceived in order to produce an external flow that could be homogeneous in the horizontal plane (except very close to the canopy top) therefore closely matching the flow description adopted in SIRANE.

Results provided by the model are therefore almost unaffected by the uncertainty related to the parameterisations adopted in the external simulated boundary layer flow as well as those due to errors in the source emissions and wind velocity, which were shown to be the most influent uncertainties in previous validations of the model (Soulhac et al., 2012). This strategy allowed us to focus on the role of the mass exchange parameterisations implemented in SIRANE (Soulhac et al., 2013) that constitute the original core of this modelling approach. Summarising, our results show the following main features:

- The reference parameterization adopted in SIRANE provides good results according to Chang and Hanna (2004) criteria, except for  $\varphi=45^\circ$ , for which  $FB$  values slightly exceed the limits;
- The results show a slight dependence of the model on the advective velocity along street axes  $U_{street}$ ;
- The values of  $u_d/u_*$  optimising the model performances are very close to their reference values, except for  $\varphi=45^\circ$ ;
- The values of  $\sigma_\varphi$  ( $\sigma_\varphi=15^\circ$ ) optimising the model performances are very close to their reference value ( $\sigma_\varphi=12^\circ$ ), for low wind directions ( $\varphi=2.5^\circ$  and  $\varphi=10^\circ$ ); they becomes larger ( $\sigma_\varphi=30^\circ$ ) for larger  $\varphi$ .

These results suggest that further investigations may be needed to enlighten the dependence of  $u_d/u^*$  for angles  $25^\circ < \varphi < 45^\circ$  and to adopt different exchange velocities evaluated locally for each single street, depending on the angle formed by the wind direction and its axis, and not a single value representative for the whole district. The idealised geometries investigated here could then be used as a reference case for further investigation on less regular city district, in order to evaluate the errors induced by an eventual oversimplification of urban texture when setting the street network geometries.

### II.1.8. Bibliography

- Balogun, A.A., Tomlin, A.S., Wood, C.R., Barlow, J.F., Belcher, S.E., Smalley, R.J., Lingard, J.J.N., Arnold, S.J., Dobre, A., Robins, A.G., Martin, D., Shallcross, D.E., 2010. In-street wind direction variability in the vicinity of a busy intersection in Central London. *Bound.-Layer Meteorol.* 136, 489–513.
- Barlow, J.F., Harman, I.N., Belcher, S.E., 2004. Scalar fluxes from urban street canyons. Part I: Laboratory simulation. *Bound.-Layer Meteorol.* 113, 369–385.
- Bentham, T., Britter, R., 2003. Spatially averaged flow within obstacle arrays. *Atmos. Environ.* 37, 2037–2043.
- Brown, M., Gowardhan, A., Nelson, M., Williams, M., Pardyjak, E., 2009. Evaluation of the QUIC wind and dispersion models using the Joint Urban 2003 Field Experiment dataset. *AMS 8th Symp Urban Env Phoenix AZ* 16.
- Buccolieri, R., Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., Di Sabatino, S., Sandberg, M., 2011. Pollutant dispersion at the neighborhood scale via wind tunnel experiments and CFD simulations. *Proc. 13th International Conference on Wind Engineering, Amsterdam (The Netherlands), July 10-15*. Presented at the *Proc. 13th International Conference on Wind Engineering, Amsterdam (The Netherlands), July 10-15*.
- Carpentieri, M., Robins, A.G., Baldi, S., 2009. Three-dimensional mapping of air flow at an urban canyon intersection. *Bound.-Layer Meteorol.* 133, 277–296.
- Carpentieri, M., Salizzoni, P., Robins, A., Soulhac, L., 2012. Evaluation of a neighbourhood scale, street network dispersion model through comparison with wind tunnel data. *Environ. Model. Softw.* 37, 110–124.
- Carruthers, D.J., Holroyd, R.J., Hunt, J.C.R., Weng, W.S., Robins, A.G., Apsley, D.D., Thomson, D.J., Smith, F.B., 1994. UK-ADMS: A new approach to modelling dispersion in the earth's atmospheric boundary layer. *J Wind Eng Ind Aerodyn* 52, 139–153.
- Castagnetti, F.B., Salizzoni, P., Garbero, V., Genon, G., Soulhac, L., 2008. Atmospheric pollution modelling in urban areas at local scale: an example of the application to a neighborhood in Turin. *Geog. Ambient. e Mineraria* 124, 63–76.
- Chang, J., Hanna, S.R., 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys* 87, 167–196.
- Christen, A., van Gorsel, E., Vogt, R., 2007. Coherent structures in urban roughness sublayer turbulence. *Int. J. Climatol.* 27, 1955–1968.
- Coceal, O., Thomas, T.G., Castro, I.P., Belcher, S.E., 2006. Mean flow and turbulence statistics over groups of urban-like cubical obstacles. *Bound.-Layer Meteorol.* 121, 491–519.
- Di Sabatino, S., Buccolieri, R., Salizzoni, P., 2013. Recent advancements in numerical modelling of flow and dispersion in urban areas: A short review. *Int. J. Environ. Pollut.* 52, 172–191.

- Dobre, A., Arnold, S.J., Smalley, R.J., Boddy, J.W.D., Barlow, J.F., Tomlin, A.S., Belcher, S.E., 2005. Flow field measurements in the proximity of an urban intersection in London, UK. *Atmos. Environ.* 39, 4647–4657.
- Duchenne, C., Armand, P., Oldrini, O., Olry, C., Moussafir, J., 2011. Application of PMSS, the parallel version of MSS, to the micrometeorological flow field and deleterious dispersion inside an extended simulation domain covering the whole Paris area, 14th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Harmo'14, Kos (Greece), Oct. 2-6, 2011.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Berrone, S., Soulhac, L., 2010a. Air pollution modelling at the urban scale and population exposure: a case study in Turin. In: 31st NATO/ SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and Its Application, 27 Sepe01 Oct, 2010, Torino, Italy.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2010b. Experimental study of pollutant dispersion within a network of streets. *Bound.-Layer Meteorol.* 136, 457–487.
- Giambini, P., Salizzoni, P., Soulhac, L., Corti, A., 2010. Influence of meteorological input parameters on urban dispersion modeling for traffic scenario analysis. In: 31st NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and Its Application, 27 Sepe01 Oct, 2010, Torino, Italy.
- Gowardhan, A.A., Pardyjak, E.R., Senocak, I., Brown, M.J., 2011. A CFD-based wind solver for an urban fast response transport and dispersion model. *Environ. Fluid Mech.* 11, 439–464.
- Gromke, C., Ruck, B., 2012. Pollutant concentrations in street canyons of different aspect ratio with avenues of trees for various wind directions. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 41–64.
- Hanna, S.R., Strimaitis, D.G., Chang, J.C., 1991. Evaluation of fourteen hazardous gas models with ammonia and hydrogen fluoride field data. *J. Hazard. Mater.* 26, 127–158.
- Hertel, O., Berkowicz, R., 1989. Modelling pollution from traffic in a street canyon. Evaluation of data and model development. DMU Luft A-129, NERI.
- Hoydysh, W.G., Dabberdt, W.F., 1994. Concentration fields at urban intersections: fluid modeling studies. *Atmos. Environ.* 28, 1849–1860.
- Jackson, P.S., 1981. On the displacement height in the logarithmic velocity profile. *J. Fluid Mech.* 111, 15–25.
- Marro, M., Salizzoni, P., Cierco, F.X., Korsakissok, I., Danzi, E., Soulhac, L., 2014. Plume rise and spread in buoyant releases from elevated sources in the lower atmosphere. *Environ. Fluid Mech.* 14, 201–219.
- McHugh, C.A., Carruthers, D.J., Edmunds, H.A., 1997. ADMS-urban: an air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution. *Int. J. Environ. Pollut.* 8, 666–674.
- Michioka, T., Sato, A., 2012. Effect of incoming turbulent structure on pollutant removal from two-dimensional street canyon. *Bound.-Layer Meteorol.* 145, 469–484.
- Moonen, P., Dorer, V., Carmeliet, J., 2011. Evaluation of the ventilation potential of courtyards and urban street canyons using RANS and LES. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 99, 414–423.
- Moussafir, J., Oldrini, O., Tinarelli, G., Sontowski, J., Dougherty, C., 2004. A new operational approach to deal with dispersion around obstacles: the MSS (Micro- Swift-Spray) software suite. *Proc. 9th Int. Conf. on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes 2*, 114–118.
- Murena, F., Di Benedetto, A., D'Onofrio, M., Vitiello, G., 2011. Mass transfer velocity and momentum vertical exchange in simulated deep street canyons. *Bound.-Layer Meteorol.* 140, 125–142.

- 
- Namdeo, A.K., Colls, J.J., 1996. Development and evaluation of SBLINE, a suite of models for the prediction of pollution concentrations from vehicles in urban areas. *Sci. Total Environ.* 189–190, 311–320.
- Narita, K., 2007. Experimental study of the transfer velocity for urban surfaces with a water evaporation method. *Bound.-Layer Meteorol.* 122, 293–320.
- Nieuwstadt, F.T.M., Van Dop, H. (Eds.), 1982. *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling*, Atmospheric Sciences Library, volume 1, Springer Netherlands.
- Perret, L., Savory, E., 2013. Large-scale structures over a single street canyon immersed in an urban-type boundary layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 148, 111–131.
- Princevac, M., Baik, J.-J., Li, X., Pan, H., Park, S.-B., 2010. Lateral channeling within rectangular arrays of cubical obstacles. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 98, 377–385.
- Rafailidis, S., 1997. Influence of building areal density and roof shape on the wind characteristics above a town. *Bound.-Layer Meteorol.* 85, 255–271.
- Robins, A., 2008. DAPPLE (dispersion of air pollution and its penetration into the local environment) experiments and modelling. *HPA Chemical Hazards and Poisons Report*, 24–28.
- Robins, A., 2011. Executive summary - the HO-DAPPLE and SIRANE projects. Final reports to the Home Office. DAPPLE 2009/13 v3. University of Surrey.
- Robins, A., Savory, E., Scaperdas, A., Grigoriadis, D., 2002. Spatial Variability and Source-Receptor Relations at a Street Intersection. *Water Air Soil Pollut. Focus* 2, 381–393.
- Röckle, R., 1990. Bestimmung der stömungsverhältnisse im Bereich Komplexer Bebauungsstrukturen. Ph.D. thesis, Vom Fachbereich Mechanik, der Technischen Hochschule Darmstadt, Germany.
- Rotach, M.W., 1993. Turbulence Close to a Rough Urban Surface. Part II: Variances and Gradients. *Bound.-Layer Meteorol.* 66, 75–92.
- Rotach, M.W., 1995. Profiles of turbulence statistics in and above an urban street canyon. *Atmos. Environ.* 29, 1473–1486.
- Salizzoni, P., 2006. Mass and Momentum Transfer in the Urban Boundary Layer. PhD Thesis. Ecole Centrale de Lyon.
- Salizzoni, P., Marro, M., Soulhac, L., Grosjean, N., Perkins, R.J., 2011. Turbulent transfer between street canyons and the overlying atmospheric boundary layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 141, 393–414.
- Salizzoni, P., Soulhac, L., Mejean, P., 2009. Street canyon ventilation and atmospheric turbulence. *Atmos. Environ.* 43, 5056–5067.
- Salizzoni, P., Soulhac, L., Méjean, P., Perkins, R.J., 2008. Influence of a two-scale surface roughness on a neutral turbulent boundary layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 127, 97–110.
- Scaperdas, A., Colville, R., Robins, A., 1998. Dispersion modelling at urban street canyon intersections: a comparison of CFD with wind tunnel modelling, in: *5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, Rodos Greece.
- Simoëns, S., Wallace, J.M., 2008. The flow across a street canyon of variable width—Part 2: scalar dispersion from a street level line source. *Atmos. Environ.* 42, 2489–2503.
- Soulhac, L., Garbero, V., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2009. Flow and dispersion in street intersections. *Atmos. Environ.* 43, 2981–2996.
- Soulhac, L., Perkins, R.J., Salizzoni, P., 2008. Flow in a street canyon for any external wind direction. *Bound.-Layer Meteorol.* 126, 365–388.

- Soulhac, L., Puel, C., Duclaux, O., Perkins, R.J., 2003. Simulations of atmospheric pollution in Greater Lyon an example of the use of nested models. *Atmos. Environ.* 37, 5147–5156.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion. Part I: presentation of the model. *Atmos. Environ.* 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D., Rios, I., 2012. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion. Part II: validation of the model on a real case study. *Atmos. Environ.* 49, 320–337.
- Tinarelli, G., Brusasca, G., Oldrini, O., Anfossi, D., Castelli, S.T., Moussafir, J., 2007. Micro-Swift-Spray (MSS): A New Modelling System for the Simulation of Dispersion at Microscale. General Description and Validation, in: Borrego, C., Norman, A.-L. (Eds.), *Air Pollution Modeling and Its Application XVII*. Springer US, pp. 449–458.
- Vinçont, J.-Y., Simoëns, S., Ayrault, M., Wallace, J.M., 2000. Passive scalar dispersion in a turbulent boundary layer from a line source at the wall and downstream of an obstacle. *J. Fluid Mech.* 424, 127–167.



## II.2. Modélisation de la dispersion d'un rejet instationnaire en milieu urbain

---

*Dans ce chapitre, nous avons évalué la performance du modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK à simuler des rejets de courte durée en milieux complexes. Dans la première partie, nous présentons le modèle numérique SIRANERISK (Lamaison et al., 2011) et ses spécificités à traiter les écoulements instationnaires. Ce modèle est construit sur le principe du modèle SIRANE (Soulhac et al., 2011) pour le transport d'une substance dans un réseau de rues ainsi que sur le principe d'un modèle à bouffées gaussiennes pour le traitement de la dispersion au-dessus de la canopée urbaine. Ensuite, nous décrivons les expériences académiques réalisées en soufflerie pour simuler des rejets de courte durée en milieu urbain et dans la couche limite atmosphérique. Ces expériences ont été répétées une centaine de fois pour chaque point de mesure afin de calculer d'une manière fiable les statistiques d'ensemble. Enfin, nous présenterons une étude de validation du modèle à l'échelle d'un quartier, avec et sans bâtiments en comparant ses résultats avec les expériences et les mesures effectuées en soufflerie.*

---

### II.2.1. Introduction

Lorsqu'un accident se produit dans un site industriel, diverses substances toxiques, inflammables ou explosives peuvent être libérées dans l'atmosphère et transportées sous l'action de la dispersion atmosphérique, sur le site et dans son voisinage. Les principaux événements survenus au cours des quinze dernières années ont montré qu'un autre risque doit être considéré, associé principalement aux attaques terroristes. Depuis l'action du métro de Tokyo en 1995, les services de sécurité à travers le monde cherchent à mieux gérer les conséquences des rejets atmosphériques de ces substances nucléaires, radiologiques, biologiques ou chimiques (NRBC). En effet, ces événements pourraient potentiellement affecter la santé ou la vie de milliers de personnes, en particulier dans les cas d'attaques terroristes dans des zones urbaines densément peuplées.

Généralement, la concentration des polluants dans l'air diminue progressivement en s'éloignant des sources. Cette concentration est considérée comme le meilleur critère qui permet de caractériser les effets toxiques de ces polluants sur la santé des riverains et sur les risques d'explosion. Afin d'estimer les conséquences d'un accident, il est donc essentiel de modéliser l'évolution temporelle et spatiale d'un panache ou d'une bouffée de polluant dans les zones entourant le site de rejet. Cela est essentiel à la fois dans l'évaluation de scénarios d'accidents (analyses de risques) ou en cas de gestion de crise (évacuation ou confinement de personnes). Dans les cas de rejets industriel ou terroriste, l'émission de polluant nocif peut être caractérisée par la variabilité de l'intensité de la source, qui est généralement de courte durée. Dans ce cas, l'échelle de temps typique liée à la libération du polluant est assez petite par rapport à l'échelle de temps caractéristique liée à l'advection et à la diffusion turbulente de la bouffée de polluants dans l'atmosphère environnante. Bien qu'il y a eu plusieurs études théoriques consacrées à l'élaboration de modèles mathématiques simulant la dispersion atmosphérique due aux rejets de courte durée (Bianconi et Tamponi, 1993; Palazzi et al., 1982; Van Ulden, 1992), nous n'avons que peu d'étude expérimentales qui traitent des rejets instationnaires non flottant.

Dans la littérature, la plupart des études expérimentales, portant sur la dispersion atmosphérique des rejets de courte durée, est axée sur des émissions de gaz denses. C'est le cas par

exemple, des expériences en soufflerie effectuées par Meroney et Lohmeyer (1984), qui ont caractérisé les statistiques de la concentration d'un ensemble de nuages denses libérés dans une couche limite turbulente, et par Davies et Hall (1996) qui ont évalué l'efficacité des barrières solides avec des expériences similaires. C'est aussi le cas des simulations expérimentales de McQuaid (1985), réalisées pour des rejets de gaz lourds à Thorney Island et qui ont été largement utilisées pour valider des codes numériques visant à simuler les effets de densité dans la dispersion atmosphérique des polluants (par exemple Anfossi et al. (2010)).

Un premier travail sur la dispersion des rejets instationnaires d'un scalaire passif est celui de Dvore et Vaglio-Laurin (1982) qui ont proposé une solution analytique approchée de la concentration moyenne en utilisant les observations de la dispersion des nuages de poussière près du sol. Un effort expérimental remarquable a été fourni par Yee et al. (1994) qui ont mené des expériences sur la dispersion d'un traceur émis par une source ponctuelle et instantanée, placée à différentes hauteurs au-dessus du sol. Les mesures de concentration qui ont été effectuées sur un grand nombre de réalisations permettent d'estimer la moyenne d'ensemble de la concentration, ainsi que les statistiques des fluctuations de concentration. La première étude en laboratoire sur la dispersion d'une émission de courte durée d'un scalaire passif dans la couche limite turbulente est celle de Robins et Fackrell (1998) (voir aussi Robins (2003)). Ces expériences en soufflerie ont permis de déterminer les principales statistiques d'ensemble sur la dispersion d'une bouffée en se focalisant principalement sur la concentration moyenne et sur l'intensité des fluctuations. Toutes ces études n'éclairent qu'une caractéristique principale de la structure d'une bouffée isolée transportée dans la basse atmosphère. Cette structure est souvent liée à sa forme allongée qui diffère sensiblement de celle prédite par la formulation analytique d'une bouffée gaussienne instationnaire. Cette forme, est bien sûr due aux effets du cisaillement du vent moyen et à la forte anisotropie de la turbulence à proximité du sol (Csanady, 1972; Hilderman et Wilson, 2008; Konopka, 1995)

La plupart des modèles de dispersion par bouffées gaussiennes évaluent les grandeurs caractéristiques de l'écoulement et de la turbulence au centre de masse de la bouffée (Sykes et al., 1998). C'est généralement le cas pour les modèles de panache gaussien (Carruthers et al., 2009). Par exemple, Sykes et Henn (1995) décrivent la distribution de la concentration (associée à un rejet instantané et ponctuel d'un polluant dans un cisaillement uniforme) par un modèle de distribution gaussienne généralisée. Cependant, la principale limitation de cette formulation est que la totalité de la bouffée doit être exposée à un cisaillement uniforme. De manière plus générale, le modèle de bouffée gaussienne suppose que les propriétés de l'écoulement et de la turbulence (qui contribuent à l'advection et l'augmentation des écarts-types) soient homogènes sur tout le volume de la bouffée. Mais dans le cas d'une couche limite, la plupart des propriétés de l'écoulement ne sont pas uniformes en fonction de la distance à la paroi. Par exemple, le profil de vitesse logarithmique induit un taux de cisaillement qui augmente à proximité de la paroi. Pour cela, nous proposons d'utiliser la dernière version du modèle SIRANERISK qui intègre un module de traitement spécifique basé sur une nouvelle détermination théorique de valeurs représentatives des principales variables qui contrôlent l'évolution d'une bouffée gaussienne généralisée. Il s'agit d'un cas particulier où le nuage de polluants est émis au niveau du sol et est exposé à un cisaillement non homogène sur l'ensemble de la bouffée. Dans ce chapitre, nous présentons une étude de validation de cette version de SIRANERISK. Pour ce faire, nous utilisons des expériences en soufflerie sur la dispersion de rejets instantanés d'un traceur passif émis par une source placée près du sol dans une couche limite turbulente neutre ou dans un quartier idéalisé, sous différentes conditions météorologiques. D'autre

part, on utilise également les mesures expérimentales réalisées par Garbero et al. (2010) pour étudier l'effet de cette nouvelle formulation mathématique sur les rejets stationnaires.

L'objectif de la première partie de ce chapitre est de donner une brève présentation du modèle SIRANERISK, en décrivant plus en détail la nouvelle paramétrisation proposée pour la dispersion dans la couche limite, tenant compte de l'effet du cisaillement. Dans la deuxième partie nous présentons une validation du modèle par rapport à des expériences réalisées dans la soufflerie du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon. Il s'agit de simulations expérimentales de rejets stationnaires et instationnaires effectuées à l'échelle d'un quartier (avec et sans bâtiments). Ces expériences ont été réalisées sur des configurations académiques qui englobent plusieurs situations météorologiques (variation de la direction et de la vitesse du vent).

## II.2.2. Présentation du modèle SIRANERISK

Le modèle SIRANERISK est un modèle opérationnel de dispersion permettant de traiter la dispersion d'un rejet instantané de substances polluantes (notamment NRBC) en milieu urbain. Ce modèle permet de répondre aux contraintes de gestion de crise, notamment en termes de temps de calcul, de simplicité des données d'entrée et de validité des résultats. Le modèle SIRANERISK est fondé sur le principe du modèle SIRANE (Soulhac et al., 2011) pour le transport d'une substance dans un réseau de rues ainsi que sur le principe d'un modèle à bouffées gaussiennes pour le traitement de la dispersion au-dessus de la canopée urbaine. Le modèle SIRANERISK permet de prendre en compte les principaux effets qui agissent sur la dispersion d'une substance à l'échelle d'un quartier tels que :

- Les phénomènes de rue-canyon (confinement des polluants entre les bâtiments)
- Les échanges des polluants au niveau des carrefours
- Le transport et la dispersion des polluants au-dessus du niveau des toits dans un champ de vent complexe.
- La modélisation des phénomènes de fluctuations de concentration et la modélisation du dépôt sec et humide.

SIRANERISK est un outil opérationnel qui utilise des modèles théoriques et des formulations simplifiées des différents phénomènes. Il est adapté au traitement d'un quartier étendu dans un temps de calcul très limité.

Nous présentons dans les paragraphes suivants les spécificités du modèle SIRANERISK, le distinguant du modèle SIRANE (II.1.3).

### II.2.2.1. Dispersion dans la canopée urbaine

#### II.2.2.1.1. SIRANE vs SIRANERISK

La modélisation de l'écoulement dans la canopée urbaine par SIRANERISK est basée sur le même principe que le modèle SIRANE (II.1.3), à la différence que ce dernier ne fournit qu'une concentration stationnaire et moyennée sur le volume total de chaque rue (Soulhac et al., 2011). SIRANERISK simule les écoulements à l'intérieur de la canopée urbaine de la même manière que SIRANE (II.1.3.2). En revanche, SIRANERISK dispose d'une nouvelle approche d'advection pour calculer l'évolution temporelle de la concentration moyennée par tronçons dans chaque rue du quartier. Ce modèle dit « modèle de boîtes mobiles » permet de traiter le caractère instationnaire de la dispersion dans la canopée urbaine (II.2.2.1.2).

Le **quartier** est considéré comme un ensemble de rues connectées au niveau des intersections. Chaque rue est décrite comme une cavité de section rectangulaire appelée "rue-canyon", caractérisée par une largeur  $W$ , une hauteur  $H$  et une longueur  $L$  (II.1.3.2) (Figure II.12).

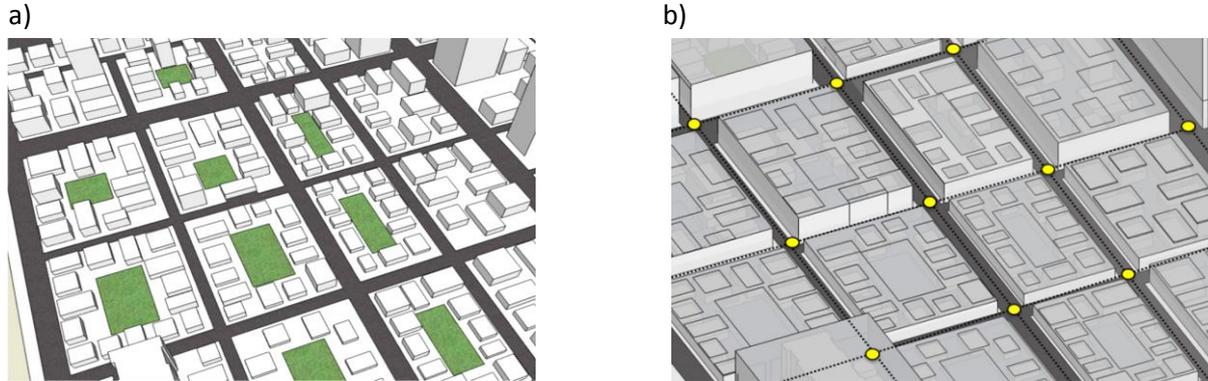


Figure II.12: Transformation d'un quartier réel (a) à un réseau de rues (b)

Le **bilan de masse dans chaque tronçon**, qui permet de relier la concentration dans la rue aux concentrations dans les rues amont et au-dessus de la rue, reste également valable pour SIRANERISK (eq. (II.2-1)). L'application de cette théorie nécessite la paramétrisation des échanges entre l'atmosphère extérieure et la canopée urbaine. Ceci a été réalisée par une étude de sensibilité dans (II.1.6) et a été exposé dans (Salizzoni et al., 2011; Soulhac et al., 2013a). La principale différence est que SIRANERISK résout un bilan instationnaire de la masse de polluants au niveau de chaque rue du quartier :

$$\frac{d(HWL_{street})}{dt} = Q + Q_E - HWU_{street}C_{street} + Q_s \quad (II.2-1)$$

La **vitesse moyenne dans chaque rue** du quartier est modélisée par l'approche décrite dans (II.1.3.2.2). Cette vitesse (eq. (II.2-2)) est variable d'une rue à l'autre suivant la direction du vent extérieur qui peut être parallèle (Soulhac et Salizzoni, 2010), perpendiculaire (Soulhac, 2000) ou avec une direction quelconque (Soulhac, 2000; Soulhac et al., 2008) par rapport à l'axe de la rue. Comme nous l'avons montré dans (II.1.6), une correction empirique est appliquée au modèle théorique (eq. (II.2-2)) pour tenir compte de la longueur finie de la rue :

$$U_{street} = u_* \cos(\theta_\infty) h \left( \frac{H}{W}, \frac{z_{0,build}}{W} \right) \quad (II.2-2)$$

L'**écoulement de l'air dans une intersection** de rues ou une place est un phénomène complexe. Pour traiter ce problème, le modèle SIRANERISK s'appuie sur le même principe que le modèle SIRANE (Soulhac et al., 2009) (II.1.3.2.3). Le calcul du transfert de masse dans chaque intersection nécessite à la fois la détermination des différents flux verticaux et horizontaux. Les flux d'air horizontaux se caractérisent par les écoulements provenant des rues situées à l'amont de l'intersection et advectés vers les rues situées en aval :

$$P_{rue,i} = \xi_i H_i W_i U_{rue,i} \quad (II.2-3)$$

où  $\xi = 1$  pour les rues situées à l'amont de l'intersection (flux entrant) et  $\xi = -1$  pour les rues situées à l'aval (flux sortant).

Lorsqu'il existe plusieurs rues en amont et en aval, les courants provenant de chaque rue s'organisent de façon quasi-bidimensionnelle, comme illustré dans Soulhac et al. (2011, 2009). Les flux de polluants échangés à chaque instant dans une intersection sont ainsi calculés de façon similaire au modèle SIRANE.

### II.2.2.1.2. Traitement spécifique de l'advection le long des rues

Pour modéliser correctement l'advection des espèces en régime instationnaire tout au long de la rue, l'utilisation d'une concentration moyennée sur le volume total de la rue n'est pas adaptée. En effet, cette approche induit une diffusion numérique artificielle le long de la rue qui conduit à une surestimation de l'étalement global d'un nuage de polluants. Pour éviter cette diffusion numérique, nous avons mis en place un algorithme qui, en tenant compte de la variabilité de la concentration le long de la rue, permet de mieux décrire les flux entrant et sortant de cette rue.

SIRANERISK considère que le volume de la rue est constitué d'une succession de volumes indépendants, appelés tronçons de rue, ayant leur propre concentration (Figure II.13).

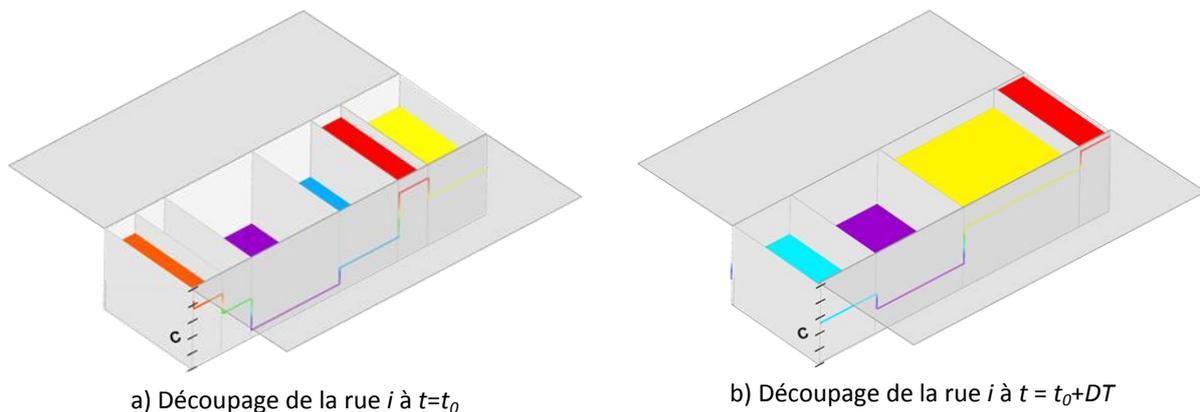


Figure II.13: Exemple de découpage de la même rue en boîtes mobiles à deux instants différents. Les couleurs indiquent les niveaux des concentrations calculées sur le volume de chaque boîte.

Dans ce cas, les phénomènes d'advection dans la rue sont modélisés par un flux d'air entrant dans la rue par l'intersection amont et un flux d'air sortant de la rue par l'intersection aval. La discrétisation de ces termes de flux pendant un pas de temps  $dt$  revient à considérer un volume d'air entrant dans la rue  $V_{entrant}$  et un volume d'air sortant de la rue  $V_{sortant}$ . Nous avons ainsi un déplacement du champ de concentration dans la rue d'une distance égale à la vitesse du vent dans la rue multipliée par le pas de temps  $dt$ . Les tronçons se déplacent le long de la rue, de sorte que le temps d'advection des polluants entre l'entrée et la sortie de la rue est respecté. Cette approche permet d'éviter une diffusion instantanée des polluants dans le volume de la rue.

### II.2.2.2. Dispersion dans la couche limite atmosphérique

Le traitement du transport et de la dispersion atmosphérique dans la couche limite située au-dessus des obstacles est plus complexe dans le modèle SIRANERISK que dans le modèle SIRANE. En effet, le caractère instationnaire des rejets nécessite une modélisation plus fine de la dispersion longitudinale (dans l'axe du vent), en particulier pour prendre en compte l'étiement du nuage de polluant par le cisaillement de l'écoulement. Nous présentons dans cette section le cadre théorique du modèle de dispersion intégré dans le modèle SIRANERISK pour des rejets près du sol (ou à l'interface canopée-atmosphère) dans la couche limite de surface atmosphérique.

La dispersion de polluants à partir de rejets situés au sol a fait l'objet d'un certain nombre d'études théoriques, expérimentales et numériques depuis plus de 50 ans. Dans un des premiers articles sur la dispersion atmosphérique, Batchelor (1964) formule une hypothèse de similitude pour décrire l'évolution des caractéristiques d'un panache émis au sol, dans une couche limite de surface. Malheureusement, l'absence de données expérimentales précises ne permit pas à Batchelor de fournir des valeurs précises des constantes numériques de son modèle. Cette approche fut

parallèlement développée, sur la base des idées de Batchelor, par Ellison (1959), Gifford (1962), Cermak (1963) et plus tard par Chatwin (1968) et par Hunt et Weber (1979). Van Ulden (1992) proposa un modèle pour la dispersion d'une bouffée cisailée, basée sur l'hypothèse de similitude. En termes de données expérimentales, il existe très peu d'expériences de référence pour décrire la dispersion de rejets instantanés passifs au sol dans une couche limite. Nickola (1971) et Dvornik et Vaglio-Laurin (1982) ont effectué des expériences de terrain pour caractériser la dispersion d'une bouffée sur un terrain plat. Robins et Fackrell (1998) ont effectué des expériences en soufflerie et ont mis en évidence un bon accord avec la théorie de similitude de Chatwin.

Au cours de cette section, nous présentons le développement d'un formalisme théorique, qui reprend l'hypothèse de similitude de Batchelor, en proposant un développement différent de ceux disponibles dans la littérature, ce qui nous permet d'obtenir une formulation analytique de l'ensemble des constantes du modèle.

La description classique d'une couche limite de surface rugueuse en stratification neutre suppose que l'ensemble des grandeurs caractéristiques de l'écoulement sont homogènes horizontalement et dépendent dimensionnellement d'une échelle de vitesse caractéristique  $u_*$  et de la distance à la paroi  $z$ . Ces grandeurs sont ainsi décrites par les relations suivantes :

- Gradient vertical de vitesse moyenne :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{u_*}{\kappa z} \quad (II.2-4)$$

où  $\kappa$  est la constante de Karman ( $\kappa = 0.4$ )

- Fluctuations de vitesse et tensions de Reynolds constantes verticalement :

$$\begin{cases} \sigma_u = \sqrt{u'^2} = \alpha_x u_* \\ \sigma_v = \sqrt{v'^2} = \alpha_y u_* \\ \sigma_w = \sqrt{w'^2} = \alpha_z u_* \\ \overline{u'w'} = -u_*^2 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \alpha_x = 2.4 \\ \alpha_y = 1.9 \\ \alpha_z = 1.3 \end{cases} \quad (II.2-5)$$

- Dissipation de l'énergie cinétique turbulente :

$$\varepsilon(z) = \frac{u_*^3}{\kappa z} \quad (II.2-6)$$

Il est possible d'exprimer les échelles de temps Lagrangiennes à partir des grandeurs précédentes, en utilisant la relation (Nieuwstadt et Van Dop, 1982) :

$$T_{L,i}(z) = \frac{2(\sigma_{u,i})^2}{C_0 \varepsilon} \quad (II.2-7)$$

où  $C_0$  est la constante de Kolmogorov ( $C_0$  est de l'ordre de 4). En utilisant les relations (II.2-6) et (II.2-7), cela fournit :

$$T_{L,i}(z) = \frac{2\kappa\alpha_{u,i}^2}{C_0} \frac{z}{u_*} \quad (II.2-8)$$

L'intégration du gradient de vitesse pour obtenir le profil de vitesse fait intervenir une échelle de longueur supplémentaire, la rugosité aérodynamique  $z_0$  :

$$\bar{u}(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (II.2-9)$$

Dans la suite, on utilisera les notations  $(u,v,w)$  pour décrire explicitement les composantes de vitesse respectivement dans les directions  $(x,y,z)$ , et la notation  $u_i$  pour décrire de manière générique la composante de vitesse dans la direction  $x_i$ .

### II.2.2.2.1. Cisaillement uniforme

Considérons un rejet instantané (à  $t = 0$ ) de scalaire passif, situé au sol dans la couche limite de surface. Le seul paramètre physique caractérisant la source est la masse  $M$  de polluant rejeté. On cherche à décrire à un instant  $t$  quelconque les caractéristiques de la bouffée de polluant. Les coordonnées de la position du centre de masse de la bouffée s'écrivent sous la forme :

$$x_{c,i}(t) = \iiint x_i \bar{c}(x,y,z,t) dx dy dz \quad (II.2-10)$$

La matrice de variances-covariances de la distribution de concentration est définie par :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_y^2 & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_z^2 \end{pmatrix} \quad \text{avec } \sigma_{ij}(t) = \iiint (x_i - x_{c,i}) \cdot (x_j - x_{c,j}) \cdot \bar{c}(x,y,z,t) dx dy dz \quad (II.2-11)$$

où  $\bar{c}$  représente la distribution spatiale de concentration, qui peut être approchée par une distribution gaussienne généralisée, basée sur les moments  $x_c$  et  $\Sigma$  (moments aux 2 premiers ordres de la vraie distribution spatiale de concentration) :

$$C = \frac{M}{(2\pi)^{3/2} \sqrt{\det(\Sigma)}} \exp\left(-\frac{1}{2} \Delta^2\right) \quad \text{avec } \Delta^2 = (x - x_c)^T \cdot \Sigma^{-1} \cdot (x - x_c) \quad (II.2-12)$$

où  $x$  est la position du récepteur et  $\Delta$  est appelée distance de Mahalanobis.

Dans un écoulement turbulent inhomogène, nous proposons de décrire l'évolution des termes de la matrice de variances-covariances par la relation suivante, prenant en compte deux effets :

$$\left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{tot} = \left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{turb} + \left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{shear} \quad (II.2-13)$$

Le premier terme de l'équation (II.2-13) traduit l'influence de la dispersion turbulente. La théorie statistique de Taylor (1921) nous permet d'exprimer ce terme en fonction des caractéristiques turbulentes de l'écoulement :

$$\left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{turb} = \begin{cases} 2\sigma_{u,i}^2 \int_0^t R_{ii}(\tau) d\tau & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (II.2-14)$$

où  $R_{ii}(\tau)$  est le coefficient d'autocorrélation Lagrangienne, qui peut être exprimé en fonction du temps Lagrangien par la relation :

$$R_{ii}(\tau) = \exp(-\tau/T_{L,i}) \quad (II.2-15)$$

ce qui permet de réécrire l'équation (II.2-14) sous la forme :

$$\left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{turb} = \begin{cases} 2\sigma_{u,i}^2 T_{L,i} [1 - \exp(-t/T_{L,i})] & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (II.2-16)$$

Le second terme de l'équation (II.2-13) traduit l'influence du cisaillement de l'écoulement moyen. Sykes et Henn (1995) ont montré que son évolution dans le temps dans le cas d'un cisaillement uniforme peut être modélisée par :

$$\left. \frac{d\sigma_{ij}}{dt} \right|_{shear} = \sigma_{ik} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + \sigma_{jk} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \quad (II.2-17)$$

Tennekes et Lumley (1972) ont proposé une solution analytique de la dispersion turbulente dans le cas d'un cisaillement uniforme ( $\bar{u}(z) = \eta z$  and  $\bar{v} = \bar{w} = 0$ , avec  $\eta$  constant) et d'une

turbulence homogène. Nous allons montrer que cette solution est une approximation de notre modèle sous certaines hypothèses que nous préciserons.

Dans le cas où le seul terme de cisaillement non nul est  $\eta = \partial \bar{u} / \partial z$ , les termes de l'équation (II.2-13) deviennent :

$$\left\{ \begin{array}{lll} \frac{d\sigma_x^2}{dt} = 2\sigma_u^2 T_{L,x} [1 - \exp(-t/T_{L,x})] + 2\sigma_{xz} \eta & \frac{d\sigma_{xy}}{dt} = \sigma_{yz} \eta & \frac{d\sigma_{xz}}{dt} = \sigma_z^2 \eta \\ \frac{d\sigma_{xy}}{dt} = \sigma_{yz} \eta & \frac{d\sigma_y^2}{dt} = 2\sigma_v^2 T_{L,y} [1 - \exp(-t/T_{L,y})] & \frac{d\sigma_{yz}}{dt} = 0 \\ \frac{d\sigma_{xz}}{dt} = \sigma_z^2 \eta & \frac{d\sigma_{yz}}{dt} = 0 & \frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2\sigma_w^2 T_{L,z} [1 - \exp(-t/T_{L,z})] \end{array} \right. \quad (II.2-18)$$

Dans le cas d'un rejet initialement ponctuel, les valeurs initiales (à  $t = 0$ ) de tous les termes  $\sigma_{ij}$  sont nulles. Il en résulte que  $\sigma_{yz}$  reste identiquement nul et, en conséquence,  $\sigma_{xy}$  reste également nul. Pour obtenir la solution de Tennekes et Lumley, il est nécessaire d'effectuer deux hypothèses supplémentaires :

- En supposant un cisaillement suffisamment important, on néglige le terme de diffusion devant le terme de cisaillement dans l'équation d'évolution de  $\sigma_x^2$ .
- On considère un temps de diffusion  $t$  grand devant les échelles de temps Lagrangiennes  $T_{L,x}, T_{L,y}, T_{L,z}$ .

En intégrant ces hypothèses dans le système d'équations (II.2-18), on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\sigma_x^2}{dt} = 2\sigma_{xz} \eta \\ \frac{d\sigma_y^2}{dt} = 2\sigma_v^2 T_{L,y} \\ \frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2\sigma_w^2 T_{L,z} \\ \frac{d\sigma_{xz}}{dt} = \sigma_z^2 \eta \end{array} \right. \quad \text{ce qui s'intègre pour donner finalement} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sigma_x^2 = \frac{2}{3} \eta^2 \sigma_w^2 T_{Lz} t^3 \\ \sigma_y^2 = 2\sigma_v^2 T_{L,y} t \\ \sigma_z^2 = 2\sigma_w^2 T_{L,z} t \\ \sigma_{xz} = \eta \sigma_w^2 T_{Lz} t^2 \end{array} \right. \quad (II.2-19)$$

qui est la solution proposée par Tennekes et Lumley (1972). Cette solution est illustrée sur la Figure II.14.

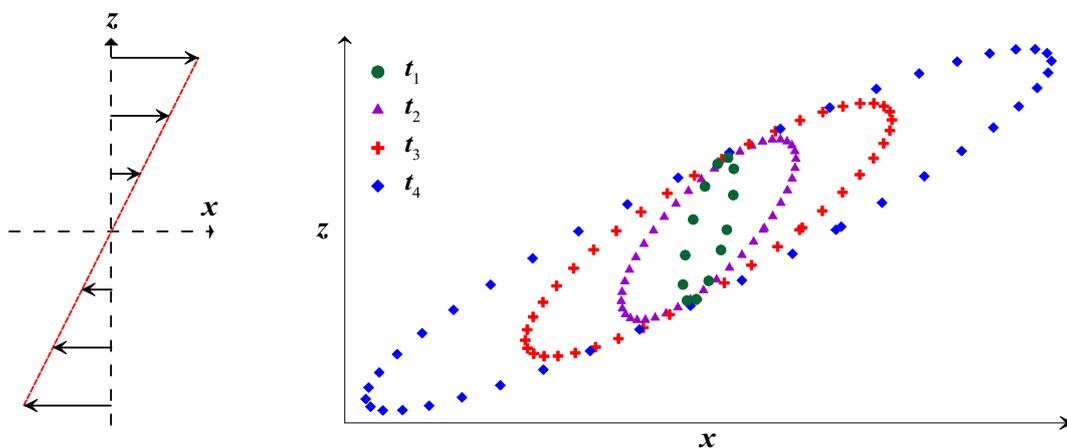


Figure II.14 : Evolution d'une bouffée dans un cisaillement pur

### II.2.2.2.2. Cisaillement non-uniforme et application à la couche limite

Dans le cas d'une couche limite de surface et contrairement à l'exemple précédent d'un cisaillement uniforme, les différentes propriétés de l'écoulement (vitesse moyenne, taux de cisaillement, temps Lagrangiens) qui déterminent l'évolution de la bouffée de polluant ne sont pas homogènes verticalement. Pour déterminer les caractéristiques macroscopiques de la bouffée (i.e. les moments de la distribution spatiale de concentration), il est donc nécessaire de définir des valeurs des propriétés de l'écoulement moyennées sur l'ensemble de la bouffée. De plus, la dimension de la bouffée évoluant au cours du temps, ces valeurs intégrées évolueront elles-mêmes en fonction du temps. L'exemple le plus évident de ce comportement est la vitesse d'advection de la bouffée. Si la bouffée est initialement rejetée au sol, sa vitesse de déplacement est théoriquement nulle. Au fur et à mesure de son étalement vertical sous l'effet de la dispersion, la bouffée « voit » du fluide de plus en plus rapide et sa vitesse d'advection augmente au cours du temps. La vitesse moyenne d'advection de la bouffée peut être déterminée en utilisant la relation (MacDonald et al., 2000) :

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \bar{u}(z) \bar{c}(z) dz dy dx}{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \bar{c}(z) dz dy dx} = \frac{\int_{z=0}^{+\infty} \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz}{\int_{z=0}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz} \\ &= \frac{u_*}{\kappa} \left[ \frac{2}{\sqrt{\pi}} A + \ln\left(\frac{\sqrt{2}\sigma_z}{z_0}\right) \right] = \frac{u_*}{\kappa} \ln\left( \underbrace{\sqrt{2} \exp\left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} A\right]}_{0,53} \frac{\sigma_z}{z_0} \right) \\ &\approx \bar{u}(0,53 \sigma_z) \end{aligned} \quad (II.2-20)$$

où :

$$A = \int_{x=0}^{+\infty} \ln(x) \exp(-x^2) dx \approx -0,87 \quad (II.2-21)$$

Ce développement mathématique permet de montrer que pour un rejet au sol, la vitesse d'advection de la bouffée correspond à la valeur du profil de vitesse à une hauteur de  $0,53 \sigma_z$  (MacDonald avait suggéré de manière erronée une valeur de  $0,55 \sigma_z$ , sans pour autant justifier le développement mathématique).

Par analogie avec cette démarche, nous avons déterminé les hauteurs caractéristiques d'évaluation des différentes grandeurs qui contrôlent l'évolution de la bouffée en fonction de  $\sigma_z$ . Ainsi, la hauteur moyenne de la bouffée (ou centre de masse) est donnée par :

$$\hat{z} = \frac{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} z \cdot \bar{c}(z) dz dy dx}{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \bar{c}(z) dz dy dx} = \frac{\int_{z=0}^{+\infty} z \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz}{\int_{z=0}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sigma_z \approx 0,8 \sigma_z \quad (II.2-22)$$

Les écarts-types des fluctuations de vitesse  $\sigma_u$ ,  $\sigma_v$  et  $\sigma_w$  sont supposés approximativement constants au voisinage de la paroi dans la couche limite de surface (Garratt, 1992). A partir de la relation (II.2-8), l'expression (II.2-23) permet d'estimer la valeur caractéristique du temps lagrangien à une hauteur de  $0,8 \sigma_z$  :

$$T_{L,i} = \frac{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} T_{L,i}(z) \bar{c}(z) dz dy dx}{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \bar{c}(z) dz dy dx} = \frac{\int_{z=0}^{+\infty} \gamma_i z \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz}{\int_{z=0}^{+\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{\sigma_z^2}\right) dz} \quad (\text{II.2-23})$$

$$= \gamma_i \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sigma_z \simeq T_{L,i}(0,8 \sigma_z) \quad \text{avec} \quad \gamma_i = \frac{2\kappa\sigma_{u,i}^2}{C_0 u_*^3}$$

Enfin, on peut également montrer par le développement ci-dessous, que le taux de cisaillement moyen sur la bouffée peut être estimé à une hauteur de  $0,69 \sigma_z$  :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \frac{\bar{u}(z) - \bar{u}(\hat{z})}{z - \hat{z}} \bar{c}(z) dz dy dx}{\int_{x=-\infty}^{+\infty} \int_{y=-\infty}^{+\infty} \int_{z=0}^{+\infty} \bar{c}(z) dz dy dx} = \frac{u_*}{\kappa \left( \frac{\sqrt{2}}{B + C \ln(\sqrt{\pi})} \sigma_z \right)} \simeq \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \Big|_{0,69 \sigma_z} \quad (\text{II.2-24})$$

où

$$\begin{cases} B = \int_{x=0}^{+\infty} \frac{\ln(x) \exp(-x^2)}{x - 1/\sqrt{\pi}} dz \simeq 5,23 \\ C = \int_{x=0}^{+\infty} \frac{\exp(-x^2)}{x - 1/\sqrt{\pi}} dz \simeq -5,55 \end{cases} \quad (\text{II.2-25})$$

On peut ainsi constater que les hauteurs représentatives des différentes grandeurs sont différentes les unes des autres et ne correspondent pas nécessairement à la hauteur du centre de masse.

Paramètres	Hauteur d'évaluation	Rapport entre la hauteur d'évaluation et $\sigma_z$
$\bar{u}$	$\bar{u}(0,53 \sigma_z) u$	$\beta_u = 0.53$
$\hat{z}$	$0,8 \sigma_z$	$\beta_z = 0.8$
$T_{L,i}$	$T_{L,i}(0,8 \sigma_z)$	$\beta_T = 0.8$
$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z}$	$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \Big _{0,69 \sigma_z}$	$\beta_s = 0.69$

Tableau II.4: Hauteurs d'évaluation des paramètres de l'écoulement vus par la bouffée

Le modèle SIRANERISK intègre l'ensemble des formulations décrites précédemment :

- Un modèle à bouffées gaussiennes généralisées
- Un modèle d'évolution des coefficients de la matrice de variances-covariances, prenant en compte l'effet du cisaillement du vent et l'effet de la turbulence
- Une paramétrisation des hauteurs d'évaluation des paramètres de l'écoulement vus par la bouffée

Dans la section suivante, nous proposons une résolution analytique des équations précédentes dans le cas d'un écoulement de couche limite de surface neutre et stationnaire. Cela nous permettra de disposer d'un modèle analytique pour la comparaison aux mesures et pour la validation de l'implémentation numérique de SIRANERISK.

### II.2.2.2.3. Résolution analytique dans le cas d'un écoulement stationnaire

#### II.2.2.2.3.1. Etalement vertical de la bouffée et loi universelle d'évolution du temps Lagrangien

Intéressons-nous à l'évolution temporelle de l'écart-type vertical  $\sigma_z$  de la bouffée, décrit par la relation (équ. (II.2-18)) :

$$\frac{d\sigma_z^2}{dt} = 2\sigma_w^2 T_{L,z} \left[ 1 - \exp\left(-t/T_{L,z}\right) \right] \quad (\text{II.2-26})$$

Nous avons montré précédemment que le temps Lagrangien vu par la bouffée pouvait se mettre sous la forme :

$$T_{L,z} = A_z \frac{\sigma_z}{u_*} \quad \text{avec} \quad A_z = \frac{2\kappa\alpha_z^2\beta_r}{C_0} \approx 0.2704 \quad (\text{II.2-27})$$

En intégrant cette équation dans la relation (II.2-26), on obtient une équation d'évolution du temps Lagrangien :

$$\frac{dT_{L,z}}{dt} = B_z \left[ 1 - \exp\left(-t/T_{L,z}\right) \right] \quad \text{avec} \quad B_z = \alpha_z^2 A_z^2 \approx 0.1236 \quad (\text{II.2-28})$$

Cette équation différentielle homogène est très intéressante car elle ne dépend d'aucun paramètre physique du problème et uniquement de la constante numérique B. Elle décrit donc un comportement universel d'évolution du temps Lagrangien vu par la bouffée en fonction du temps, quelles que soient les caractéristiques de la couche limite de surface ( $u_*$ ,  $z_0$ ). Ce résultat est en accord avec l'hypothèse de similitude de Batchelor (1964) et avait déjà été mis en évidence par Hunt et Weber (1978).

La solution de cette équation homogène est très dépendante de la valeur initiale (à  $t = 0$ ) du rapport  $T_{L,z}/t$ . En utilisant l'approximation classique d'une dispersion balistique ( $\sigma_z = \sigma_w t$ ) pour des temps courts, on obtient comme valeur initiale de ce rapport :

$$\left. \frac{T_{L,z}}{t} \right|_{t=0} = \alpha_z A_z \approx 0.3515 \quad (\text{II.2-29})$$

L'équation (II.2-28) n'admet pas de solution analytique mais une résolution numérique met en évidence que pour cette condition initiale, la solution est très proche de la relation linéaire :

$$T_{L,z}(t) = B_z t \approx 0.1236 t \quad (\text{II.2-30})$$

Cette relation universelle devrait être vérifiée pour tout rejet ponctuel au sol dans une couche limite de surface neutre. Il est intéressant de noter que ce résultat nous indique que le rapport  $t/T_{L,z}$  est de l'ordre de 8, pour tout instant  $t$ . Du point de vue de la théorie de Taylor, cela signifie que l'on se situe dans un régime de diffusion de Fick à tout instant, puisque le temps Lagrangien augmente en même temps que le temps  $t$ . Ce résultat permet de justifier que les approches Eulériennes, basées sur une diffusivité turbulente  $K_z$ , fonctionnent relativement bien pour des rejets au sol, même à des distances proches de la source.

En introduisant ce résultat dans l'équation (II.2-27), on obtient une relation générale pour l'écart-type vertical de la bouffée :

$$\sigma_z(t) = C_z u_* t \quad \text{avec} \quad C_z = B_z/A_z \approx 0.4570 \quad (\text{II.2-31})$$

### II.2.2.2.3.2. Ecart-type transversal

L'évolution temporelle de l'écart-type transversal  $\sigma_y$  est donnée par :

$$\frac{d\sigma_y^2}{dt} = 2\sigma_y^2 T_{L,y} \left[ 1 - \exp\left(-t/T_{L,y}\right) \right] \quad (\text{II.2-32})$$

L'échelle de temps lagrangienne associée est :

$$T_{L,y} = A_y \frac{\sigma_z}{u_*} \quad \text{avec} \quad A_y = \frac{2\kappa\alpha_y^2\beta_T}{C_0} \approx 0.5776 \quad (\text{II.2-33})$$

soit, en utilisant la relation (II.2-31):

$$T_{L,y}(t) = B_y t \quad \text{avec} \quad B_y = A_y C_z \approx 0.2639 \quad (\text{II.2-34})$$

En intégrant la relation (II.2-32) avec l'équation (II.2-34), on obtient finalement :

$$\sigma_y(t) = C_y u_* t \quad \text{avec} \quad C_y = \alpha_y \sqrt{B_y \left[ 1 - \exp(-1/B_y) \right]} \approx 0.9650 \quad (\text{II.2-35})$$

### II.2.2.2.3.3. Ecart-type longitudinal

L'évolution de l'écart-type longitudinal  $\sigma_x$  est définie par :

$$\begin{cases} \frac{d\sigma_{xz}}{dt} = \sigma_z^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \\ \frac{d\sigma_x^2}{dt} = 2\sigma_x^2 T_{L,x} \left[ 1 - \exp(-t/T_{L,x}) \right] + 2\sigma_{xz} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \end{cases} \quad (\text{II.2-36})$$

En combinant les relations (II.2-24) et (II.2-31), on montre que le taux de cisaillement moyen vu par la bouffée ne dépend que du temps :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} = \frac{D}{t} \quad \text{avec} \quad D = \frac{1}{\kappa C_z \beta_s} \approx 7.929 \quad (\text{II.2-37})$$

En utilisant cette équation et en exprimant le terme de dispersion turbulente par analogie au terme transversal selon  $y$ , on obtient :

$$\begin{cases} \frac{d\sigma_{xz}}{dt} = C_z^2 D u_*^2 t \Rightarrow \sigma_{xz}(t) = \frac{C_z^2 D}{2} u_*^2 t^2 \\ \frac{d\sigma_x^2}{dt} = \left\{ 2\alpha_x^2 B_x \left[ 1 - \exp(-1/B_x) \right] + C_z^2 D^2 \right\} u_*^2 t \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} A_x = \frac{2\kappa\alpha_x^2\beta_T}{C_0} \approx 0.9216 \\ B_x = \frac{A_x B_z}{A_z} \approx 0.4211 \end{cases} \quad (\text{II.2-38})$$

L'intégration de la relation (II.2-38) fournit finalement pour l'écart-type longitudinal :

$$\sigma_x(t) = C_x u_* t \quad \text{avec} \quad C_x = \sqrt{\alpha_x^2 B_x \left[ 1 - \exp(-1/B_x) \right] + \frac{C_z^2 D^2}{2}} \approx 2.960 \quad (\text{II.2-39})$$

### II.2.2.2.3.4. Vitesse d'advection et position longitudinale du centre de masse

L'évolution temporelle de la vitesse d'advection moyenne de la bouffée est fournie par la relation (équations (II.2-20) et (II.2-31)) :

$$\bar{u}(t) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left( \frac{\beta_u \sigma_z(t)}{z_0} \right) = \frac{u_*}{\kappa} \ln \left( \beta_u C_z \frac{u_* t}{z_0} \right) \quad (\text{II.2-40})$$

En réalité, cette relation n'a de sens ( $\bar{u} \geq 0$ ) que pour  $t \geq \frac{z_0}{\beta_u C_z u_*}$  mais cette limite étant très faible

devant le temps caractéristique de transport d'une bouffée, cette restriction n'a pas de conséquence pratique. Pour déterminer la distance parcourue par le centre de masse de la bouffée, il suffit d'intégrer la vitesse d'advection :

$$x_c(t) = \int_0^t \bar{u}(\tau) d\tau \quad (\text{II.2-41})$$

En utilisant la relation (II.2-40), on obtient :

$$\frac{x_c(t)}{z_0} = \frac{\xi}{\kappa} [\ln(E\xi) - 1] \quad \text{avec} \quad \xi = \frac{u_* t}{z_0} \quad \text{et} \quad E = \beta_u C_z \approx 0.2422 \quad (\text{II.2-42})$$

Par ailleurs, pour comparaison avec les données expérimentales, il est utile de transformer l'étalement longitudinal  $\sigma_x$  en étalement temporel  $\sigma_t$ , en un point d'observation fixe situé à une distance  $x$  de la source, en effectuant une hypothèse de type Taylor :

$$\sigma_t(x) = \frac{\sigma_x(t_x)}{\bar{u}(t_x)} = \frac{\kappa C_x t_x}{\ln\left(\beta_u C_z \frac{u_* t_x}{z_0}\right)} \quad \text{avec} \quad t_x \quad \text{tel que} \quad x_c(t_x) = x \quad (\text{II.2-43})$$

ce qui donne, en adimensionnant :

$$\frac{\sigma_t(x) u_*}{z_0} = \frac{F \xi_x}{\ln(\xi_x) + G} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \xi_x = \frac{u_* t_x}{z_0} \\ F = \kappa C_x \approx 1.025 \\ G = \ln(\beta_u C_z) \approx -1.418 \end{cases} \quad (\text{II.2-44})$$

Le modèle analytique détaillé précédemment fournit une description universelle de la dispersion pour une source au sol dans une couche limite de surface neutre et stationnaire. Ce modèle vérifie l'hypothèse de similitude de Batchelor et propose une modélisation théorique de l'ensemble des constantes numériques mises en jeu. Ce modèle permet de tirer un certain nombre de conclusions sur la dispersion à partir d'une source au sol dans une couche limite :

- Le cisaillement du profil de vitesse n'affecte pas l'évolution des écarts-types  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$  dans les directions transversales et verticales. On peut ainsi s'attendre à ce que le comportement d'un panache (associé à un rejet stationnaire), qui ne dépend que de ces deux écarts-types, soit peu affecté par la prise en compte du cisaillement.
- Le temps d'arrivée du centre d'une bouffée (maximum de concentration), qui dépend de la vitesse d'advection, elle-même dépendante de l'étalement vertical  $\sigma_z$ , devrait également être peu dépendant de la prise en compte du cisaillement du vent.
- En revanche, l'étalement longitudinal  $\sigma_x$  et l'étalement temporel  $\sigma_t$  au niveau d'un récepteur sont directement influencés (augmentés) par le cisaillement de l'écoulement. En conséquence, la concentration maximale au sein de la bouffée devrait également être affectée par le cisaillement, en étant réduite par l'augmentation de l'étalement longitudinal.

Pour évaluer la validité du modèle de bouffée gaussienne généralisée implémenté dans SIRANERISK, une expérience de référence a été réalisée sur la dispersion d'un rejet instantané dans un écoulement de couche limite. Cette expérience est synthétisée dans la section (II.2.3.2.1). Une expérience complémentaire a également été effectuée dans une configuration de quartier urbain idéalisé. L'ensemble des configurations expérimentales utilisées pour la validation de SIRANERISK sont présentées dans la section suivante.

### II.2.3. Expériences en soufflerie

Les campagnes de mesures utilisées pour la validation de SIRANERISK ont toutes été réalisées dans la grande soufflerie du LMFA de l'ECL. Nous avons utilisé les expériences présentées par Garbero et al. (2010) et Cierco et al. (2012) pour valider les résultats de SIRANERISK respectivement

dans le cas des rejets continus et des rejets de courte durée, en couche limite (Figure II.16c) et dans un milieu urbain (Figure II.16d).

### **II.2.3.1. Rejets continus dans un milieu urbain (Garbero et al., 2010b)**

Les expériences de Garbero et al. (2010) sont présentées dans la section (II.1.4) du premier chapitre de cette partie. Elles concernent des simulations expérimentales des rejets continus dans un milieu urbain sous différentes directions du vent ( $\theta = 2.5^\circ$ ;  $\theta = 12.5^\circ$ ;  $\theta = 27.5^\circ$ ;  $\theta = 47.5^\circ$ ). La canopée urbaine a été modélisée par une maquette d'un quartier idéalisé installé dans la soufflerie à une échelle de  $1/400^e$ . Les mesures ont été effectuées à plusieurs distances de la source et ont été utilisées dans la première partie de ce chapitre pour la validation et le calibrage des paramètres du modèle SIRANE (II.1.5). Nous avons utilisé ces campagnes de mesure dans cette partie pour valider les résultats de SIRANERISK dans le cas des rejets continus de polluants.

### **II.2.3.2. Rejets de courte durée dans un milieu urbain (F.-X. Cierco et al., 2008)**

Les expériences présentées dans Cierco et al. (2012) prévoyaient à la fois l'étude académique des fluctuations de concentrations et la constitution d'une base de données pour la validation du modèle SIRANERISK. Elles permettent ainsi de disposer de deux campagnes de mesures qui sont utilisées dans cette étude pour valider les résultats du modèle SIRANERISK. La première campagne (Cierco et Soulhac, 2009a), appelée campagne R, nous a permis d'étudier le comportement d'un rejet instationnaire dans un profil de vitesse de type couche limite rugueuse pour plusieurs niveaux de rugosité aérodynamique au sol. La deuxième campagne appelée campagne B (Cierco et Soulhac, 2009b), décrit la dispersion des rejets de courte durée dans un milieu urbain idéalisé, dont la maquette utilisée dans les simulations expérimentales est similaire à celle présentée par Garbero et al. (2010).

Les expériences de Cierco et al. (2008) ont consisté à effectuer un grand nombre de fois un rejet de courte durée de 0,17s, représentant dans l'atmosphère un rejet de 68s au sein de la canopée urbaine, et à mesurer par FID le signal d'évolution temporelle de la concentration en différents points récepteurs placés à différentes distances en aval de la source. Cette durée de rejet n'est pas rigoureusement instantanée mais était nécessaire pour émettre une quantité suffisante de polluant afin que le nuage soit détectable à 4m de la source, sans pour autant induire une vitesse de rejet trop importante qui aurait perturbé la dispersion initiale de la bouffée. Afin d'obtenir une description statistique suffisante de la variabilité turbulente, 100 réalisations du rejet ont été effectuées pour mesurer 100 signaux temporels pour chaque point récepteur considéré. L'idée de reproduire la même expérience une centaine de fois est de construire une base de données pour effectuer des statistiques sur un grand nombre de réalisations. Nous présentons sur la Figure II.15 quelques exemples des signaux instantanés qui illustrent bien leur variabilité par rapport au signal moyen (moyenne d'ensemble) utilisé pour la validation du modèle direct de dispersion.

#### **II.2.3.2.1. Campagne de mesure R (R20 et R50)**

Ces simulations expérimentales reproduisent l'écoulement d'un rejet instationnaire dans une couche limite atmosphérique rugueuse pour deux profils de vitesse logarithmique obtenus avec deux rugosités aérodynamiques différentes (Tableau II.5). La première configuration (appelée R20), est associée à des obstacles de 20 mm distants de 15 cm, qui correspondent, à une échelle de  $1/400^e$ , à des obstacles de 8 m distants de 60 m et à une rugosité aérodynamique de 7 cm. La seconde configuration (appelée R50), est associée à des obstacles de 50 mm distants de 50 mm, qui correspondent à une échelle de  $1/400^e$ , à des obstacles de 20 m distants de 20 m et à une rugosité

aérodynamique de 65 cm (Tableau II.5). La turbulence est générée principalement par une rangée d'ailerons (Irwin, 1981) de hauteur 500 mm et 1000 mm respectivement pour les configurations R20 et R50. Les hauteurs de la mesure et du rejet sont identiques dans chaque configuration et elles sont égales à 25mm pour R20 et à 60 mm pour R50, représentant respectivement 10 m et 24 m à l'échelle de 1/400<sup>e</sup>.

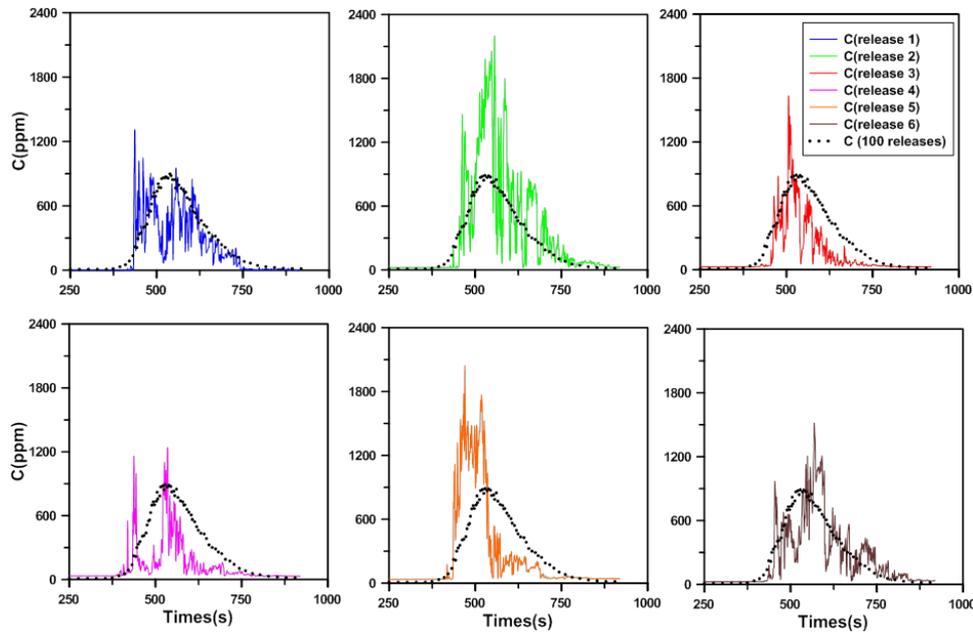


Figure II.15: Evolution temporelle de la concentration en aval d'une source instantanée : exemple de 6 réalisations particulières du rejet (en couleur) comparées à la moyenne d'ensemble du signal (en noir), obtenues lors d'expériences en soufflerie (Cierco et al., 2012).

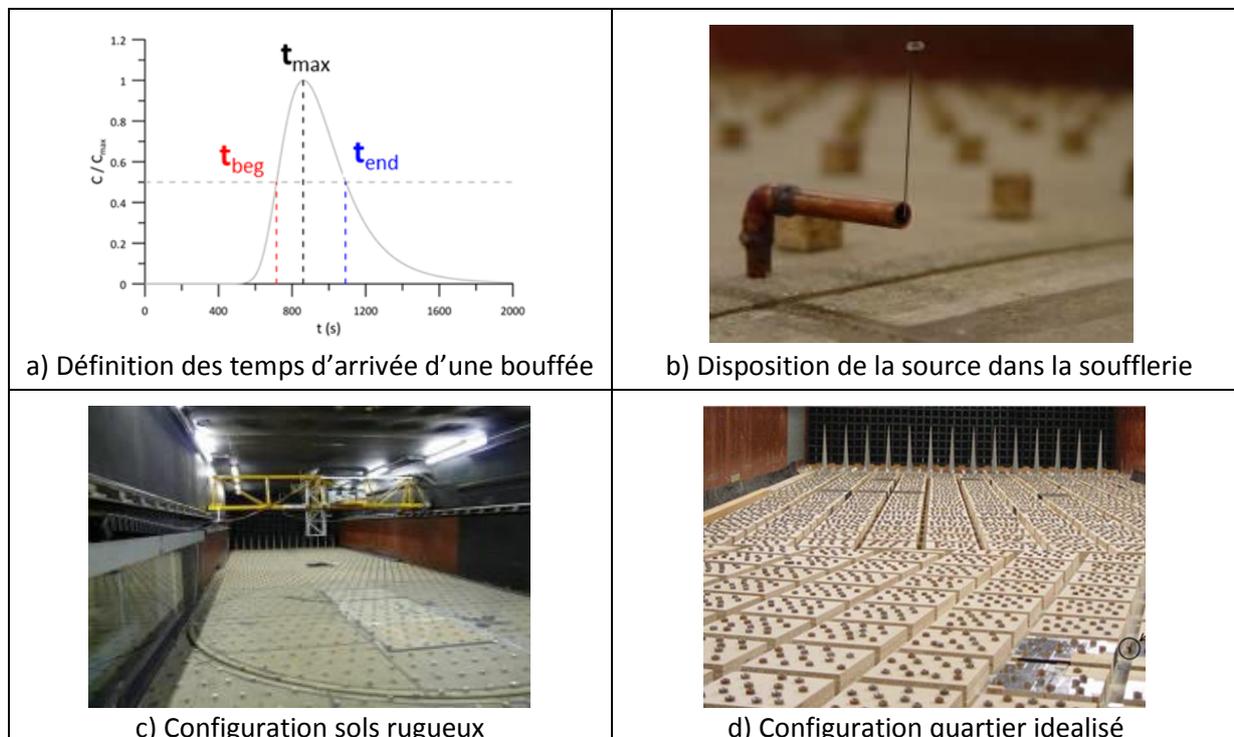


Figure II.16: Définition des temps d'arrivée d'une bouffée (a) et disposition de la source dans la soufflerie (b). Vue générale des configurations sols rugueux (c) et canopée urbaine (d)

### II.2.3.2.2. Campagne de mesure B (B30 et B45)

Ces simulations étaient destinées à la prise en compte de la topographie urbaine, représentée par un quartier idéalisé, sur l'écoulement et la dispersion des polluants. La maquette est similaire à celle de Garbero et al. (2010b) mais dans ces expériences, Cierco et Soulhac (2009b) ont mis en œuvre un seul rapport d'aspect  $H/W=1$  ( $H=W=50\text{mm}$ , où  $H$  et  $W$  représentent respectivement la hauteur des bâtiments et la largeur de la rue). Ce protocole a été mis en œuvre pour deux directions de vent ( $\theta = 30^\circ$ ;  $\theta = 45^\circ$ ) par rapport à l'axe du quartier formant respectivement les deux configurations B30 et B45. Le rejet instantané a été effectué à l'intérieur de la canopée urbaine à  $H/2$ , comme décrit dans (II.2.3.2). La source (Figure II.16) est placée aux coordonnées réelles (0, 0, 10 m) et les récepteurs sont variables en  $x$  et  $y$  mais fixes en  $z$ . En effet, ils sont placés à une hauteur  $z=10$  m quand les mesures sont effectuées à l'intérieur de la canopée ou à  $z=2H=40$  m quand la mesure concerne l'atmosphère extérieure. A l'intérieur de la canopée, une dizaine de récepteurs ont été placés aux milieux des rues et au niveau des intersections pour bien étudier la canalisation de l'écoulement entre les obstacles.

	Sols Rugueux			Quartiers	
Directions du vent	0° (Indifférent)			30°	45°
Hauteurs des bâtiments	Pas de bâtiments			$H = 50$ mm	
Rugosité (/source)	<b>R0</b> $H_{\text{aval}} = 0$ mm $H_{\text{amont}} = 20$ mm	<b>R20</b> $H = 20$ mm	<b>R50</b> $H = 50$ mm	<b>B30</b>	<b>B45</b>
				Ecrus de 10mm sur les toits	
Turbulence entrée	Irwin 500	Irwin 500	Irwin 1000	Irwin 500	
Hauteur de rejet	$H_r = 25$ mm > H	$H_r = 25$ mm > H	$H_r = 60$ mm > H	$H_r = H/2 = 25$ mm	
Hauteur de mesure	$Z = H_r = 25$ mm	$Z = H_r = 25$ mm	$Z = H_r = 60$ mm	$H/2 = 25$ mm – canopée $2H = 100$ mm - CLA	

Tableau II.5 : Récapitulatif des caractéristiques expérimentales concernant la géométrie et le rejet dans chaque configuration réalisée par Cierco et Soulhac, (2009c). Les données sont fournies à l'échelle de la soufflerie avec le rapport d'échelle 1/400<sup>e</sup>.

## II.2.4. Validation du modèle direct SIRANERISK

L'objectif de cette partie est de tester la fiabilité de SIRANERISK en comparant ses résultats avec les mesures effectuées en soufflerie, en prenant en compte les différents modèles présentés ci-dessus (modèle de bouffée gaussienne généralisée et modèle d'advection type « boîtes mobiles »). Cette comparaison nous permet d'évaluer le comportement de SIRANERISK dans des configurations académiques complexes.

### II.2.4.1. Sol rugueux

La simulation de la dispersion sur un sol rugueux (rejets stationnaires ou instationnaires) a été effectuée par SIRANERISK sans et avec le modèle de cisaillement. Dans le cas d'un rejet stationnaire sur des sols rugueux (R20 et R50), les profils de concentration adimensionnée calculés avec et sans cisaillement sont quasi-identiques (Figure II.17). En effet, comme nous l'avons indiqué plus haut, le

cisaillement du vent n'a pas d'influence sur l'évolution des écarts-types transversaux et verticaux représentés sur la Figure II.17. Le cisaillement a uniquement un effet sur la diffusion longitudinale mais dans le cas d'un rejet stationnaire, cet effet est compensé par le fait qu'une multitude de bouffées se suivent et se superposent, annulant l'effet de l'étalement longitudinal. Les écarts mineurs observés dans les résultats du modèle, entre les cas avec et sans cisaillement, proviennent uniquement de la sommation numérique de bouffées d'étalements différents.

Dans le cas d'un rejet instationnaire, nous avons représenté sur les Figures II.18 et II.19, les évolutions temporelles de concentration adimensionnée respectivement dans les configurations R20 et R50, pour 5 positions latérales de récepteurs. Les profils des concentrations sont mesurés à différentes distances en aval de la source. Comme le prévoyaient nos résultats théoriques, les signaux de concentration fournis par SIRANERISK en activant le modèle de cisaillement des bouffées sont assez différents de ceux calculés sans activation du modèle. De même, les concentrations maximales et les étalements temporels des signaux de chaque récepteur sont assez différents (Figure II.18 et Figure II.19). Nous observons de même dans la Figure II.20-a que seules les concentrations adimensionnées maximales calculées par le modèle à bouffées gaussiennes cisillées reproduisent correctement les concentrations mesurées en soufflerie. Ceci peut s'expliquer par l'effet de cisaillement qui provoque une dilution de la bouffée de polluant en augmentant sa dimension longitudinale par étirement dans le sens de l'écoulement. Pour la même quantité de masse rejetée dans l'atmosphère, ce phénomène d'étirement du panache conduit à une diminution de l'intensité de concentration par rapport au panache simulé en utilisant le modèle gaussien classique sans cisaillement. Cependant, il est tout à fait normal que concentrations intégrées de polluant observées au niveau des récepteurs soient bien reproduites par le modèle avec ou sans cisaillement (Figure II.20-b) puisque les deux effets se compensent et que les écarts-types transversaux et verticaux du panache ne sont pas affectés par le cisaillement.

La comparaison des temps d'advection, définis par les temps d'arrivée des pics de concentration, et des étalements des signaux de concentrations, caractérisés par la différence ( $t_{end} - t_{beg}$ ) (Figure II.16-a), montre que ces paramètres fondamentaux sont bien reproduits dans les configurations R20 (Figure II.18) et R50 (Figure II.19) en utilisant le modèle à bouffées gaussiennes cisillées (Figure II.20-c et Figure II.20-d). Comme nous l'avons prédit dans notre modèle théorique, le temps d'arrivée du centre de masse de la bouffée (ou du maximum de concentration) n'est que très peu sensible à l'effet du cisaillement. En effet, ce temps est contrôlé par la vitesse d'advection, qui dépend principalement de l'étalement transversal. En revanche, l'étalement temporel est significativement influencé par le cisaillement et on constate que les données expérimentales sont en meilleur accord avec la simulation prenant en compte le cisaillement.

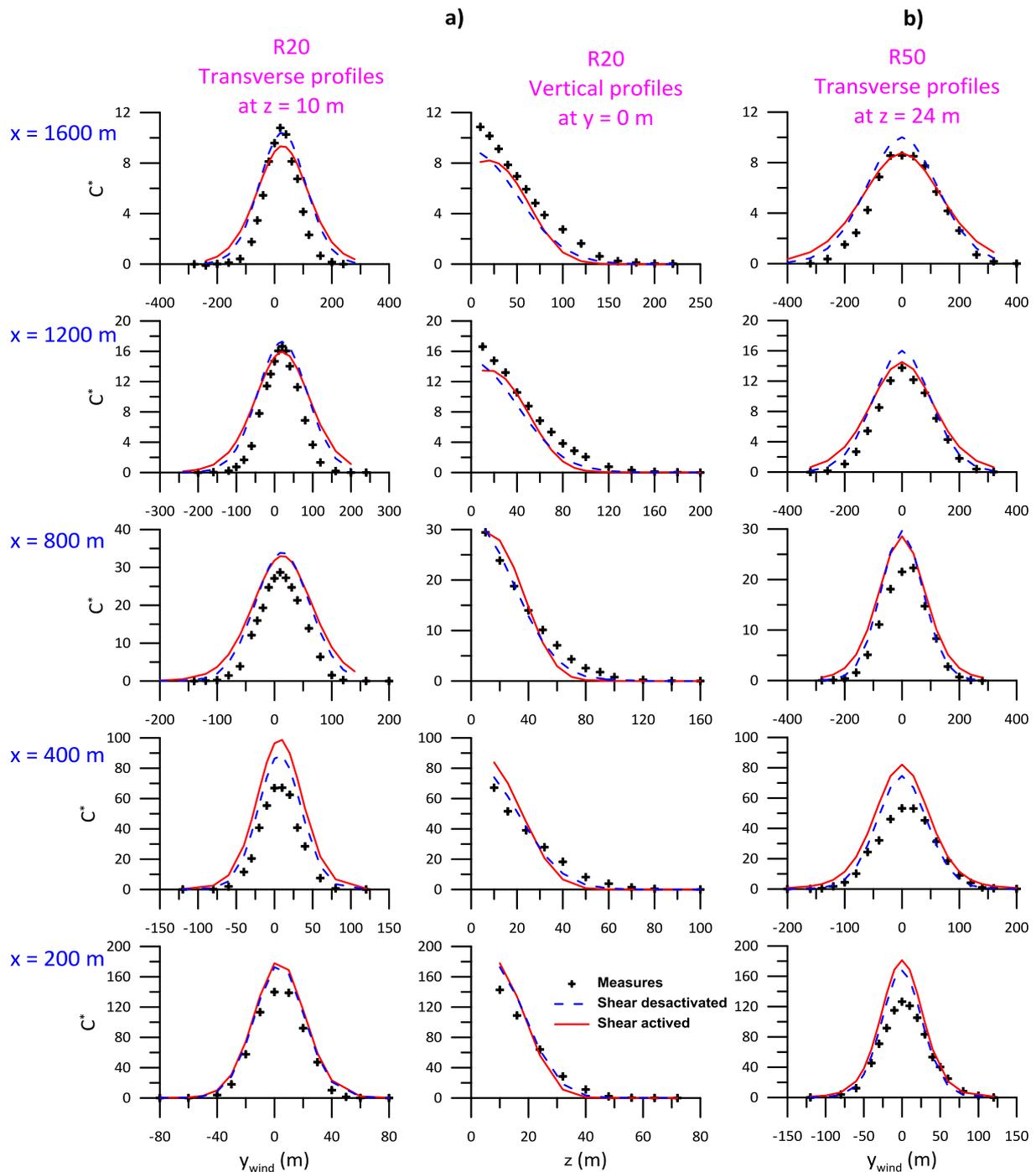


Figure II.17 : Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source dans les configurations de sols rugueux R20 (a) et R50 (b) dont le rejet est stationnaire. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir), du modèle à bouffée gaussienne généralisée (en rouge) et du modèle à bouffée gaussienne classique sans cisaillement (en trait interrompu bleu)

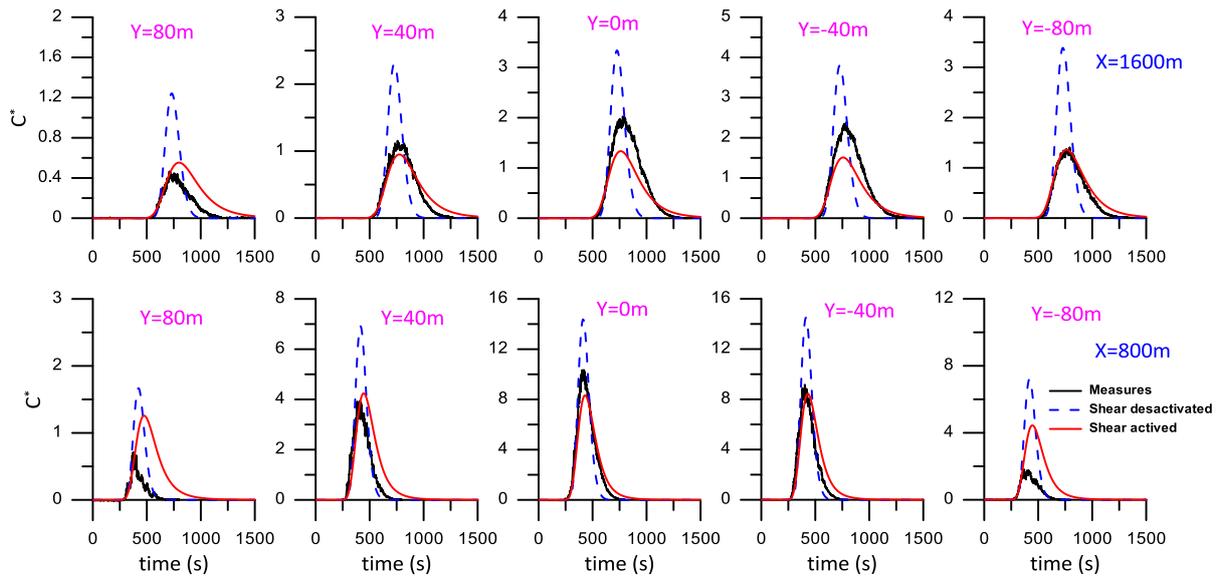


Figure II.18 : Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à deux positions ( $X=1600m$  et  $X=800m$ ) en aval de la source dans la configuration R20 avec un rejet instationnaire de polluant. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir), du modèle à bouffée gaussienne généralisée (en rouge) et du modèle à bouffée gaussienne classique sans cisaillement (en trait interrompu bleu).

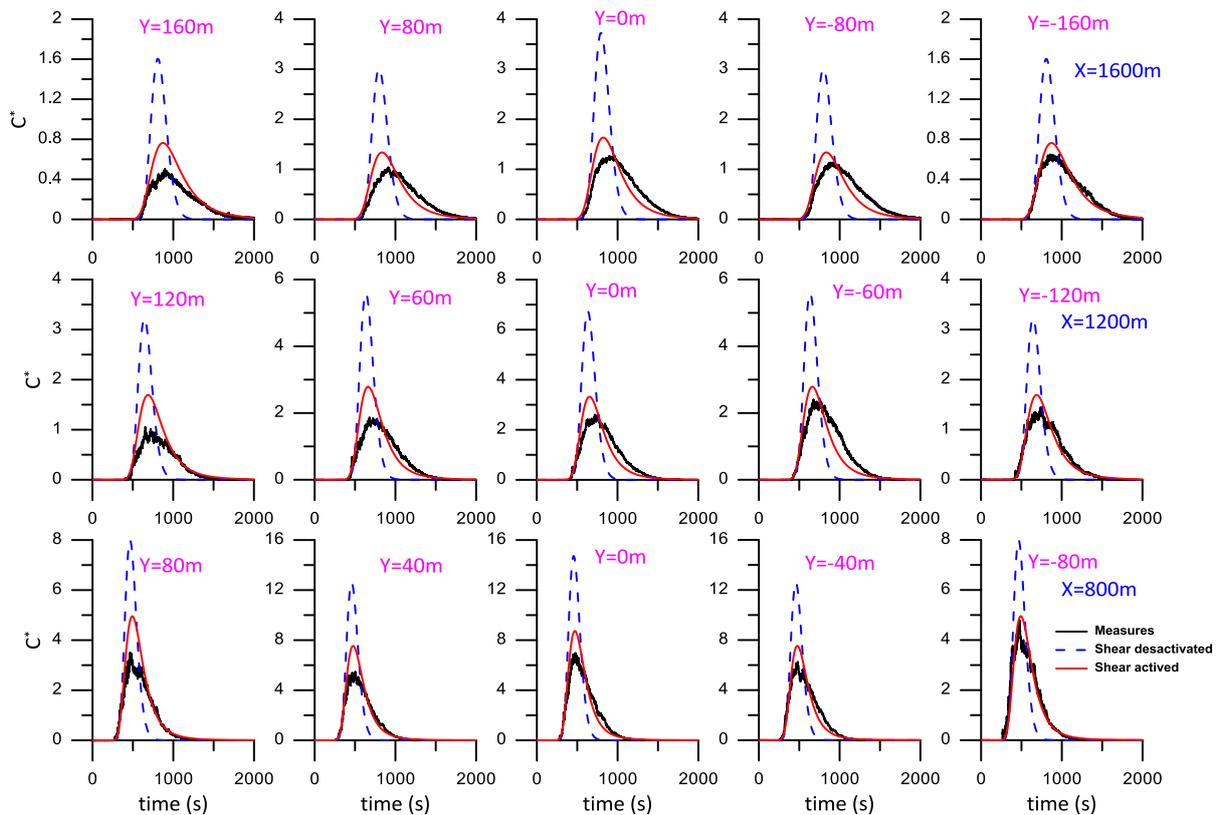


Figure II.19 : Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$ , à 3 positions ( $X=1600m$ ,  $X=1200m$  et  $X=800m$ ) en aval de la source dans la configuration R50 avec un rejet instationnaire de polluant. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir), du modèle à bouffée gaussienne généralisée (en rouge) et du modèle à bouffée gaussienne classique sans cisaillement (en trait interrompu bleu).

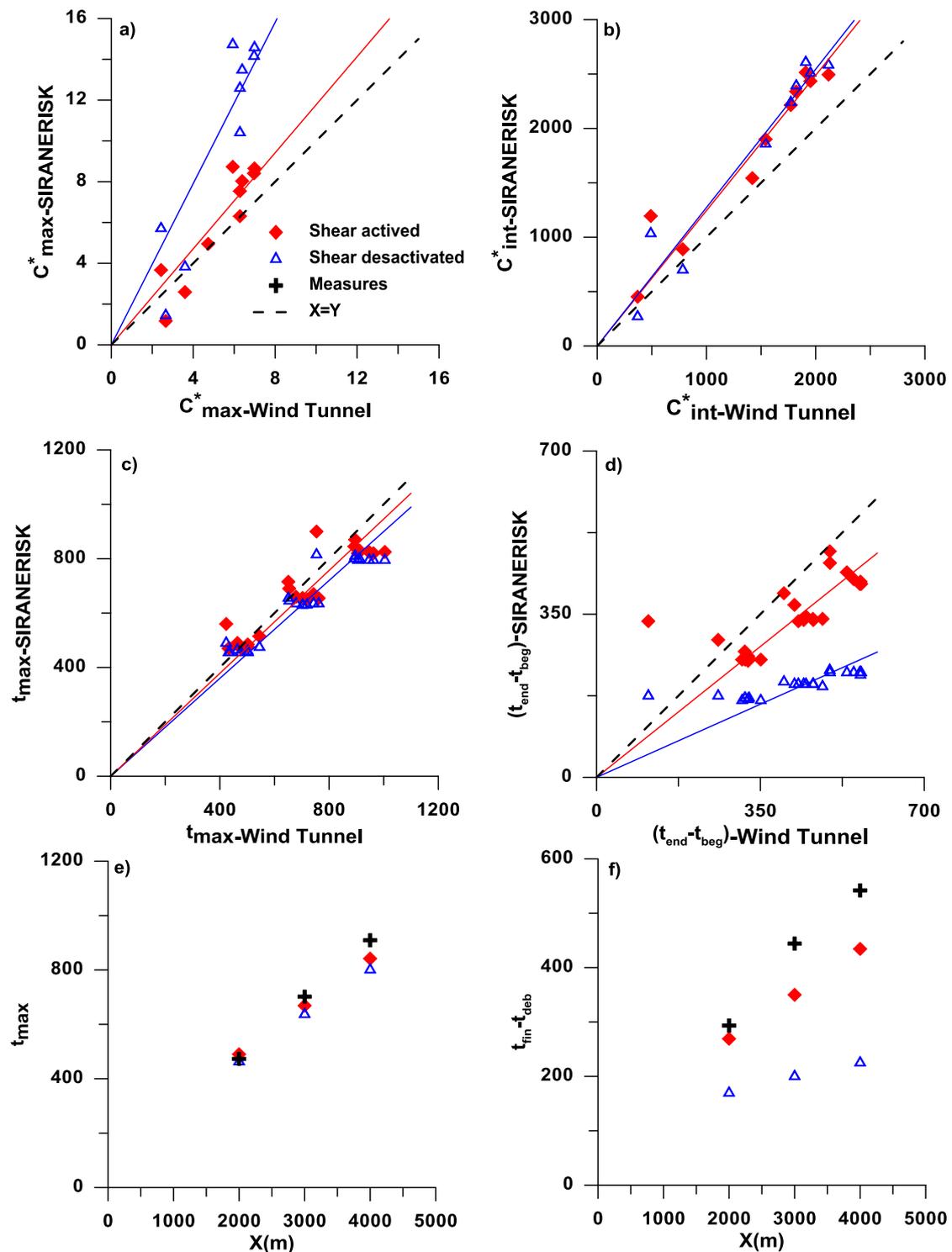


Figure II.20: Droites d'ajustement entre les données expérimentales (en noir) et les résultats de SIRANERISK avec effets de cisaillement (en rouge) et sans effet de cisaillement (en bleu) : (a) Concentrations adimensionnées maximales, (b) concentrations intégrées au cours du temps, (c) temps d'advection, (d) étalement du panache. Comparaison des évolutions du temps d'advection (e) et d'étalement du panache (f) entre les mesures en soufflerie (en noir) et les résultats numériques avec (en rouge) et sans effet de cisaillement (en bleu) en fonction de la distance en aval de la source. Les temps sont transposés à l'échelle réelle avec un facteur d'échelle  $1/400^e$ .

Ces différents résultats permettent de conclure sur la validité du modèle à bouffée gaussienne généralisée pour décrire la dispersion d'un rejet instantané dans une couche limite. En effet, seule la prise en compte des effets de cisaillement dans les modèles de dispersion atmosphérique permet de reproduire certaines caractéristiques fondamentales des signaux tels que leur pic de concentration et leur étalement longitudinal temporel.

Afin de compléter l'analyse précédente, nous avons comparé sur la Figure II.21 le modèle théorique, issu des équations implémentées dans SIRANERISK pour le transport et la dispersion d'une bouffée gaussienne généralisée, avec nos données mesurées en soufflerie dans les configurations R20 et R50, avec les données expérimentales de Robins et Fackrell (1998), ainsi qu'avec les modèles de Chatwin (1968) et de Deardorff (1974), basés sur l'hypothèse de similitude de Batchelor (1964).

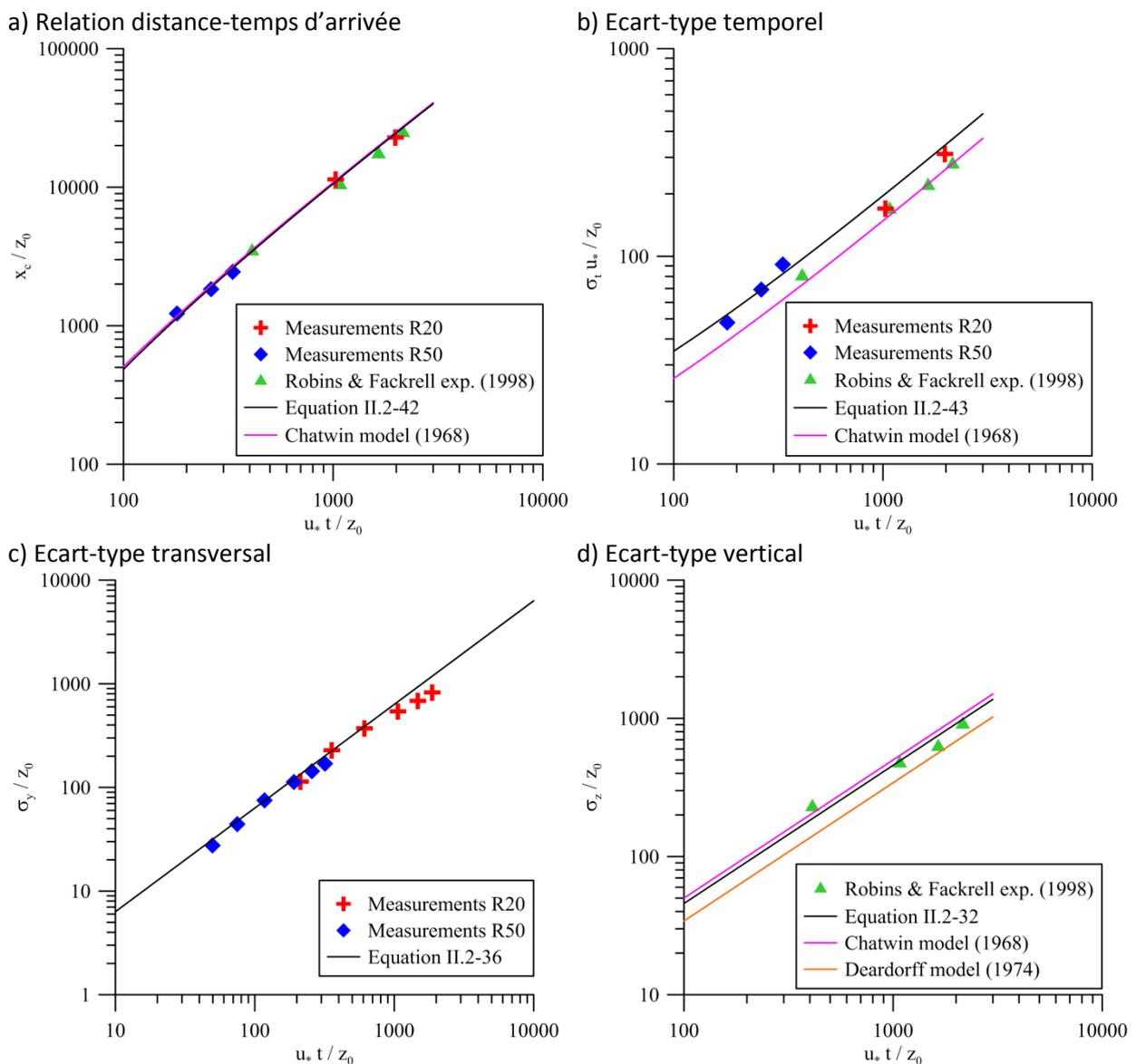


Figure II.21 : Comparaison du modèle théorique proposé avec les données en soufflerie sur les configurations R20 et R50, les données de Robins et Fackrell (1998) et les modèles de Chatwin (1968) et de Deardorff (1974).

Ces comparaisons indiquent un très bon accord entre notre modèle et les différentes données expérimentales. Cela confirme le caractère universel de la description de la dispersion pour une source au sol dans une couche limite de surface. Cela indique également que le modèle implémenté dans SIRANERISK représente correctement l'ensemble des effets qui décrivent le comportement d'une bouffée de polluant émise au sol dans une couche limite de surface.

Nous allons poursuivre dans la section suivante avec l'étude et la modélisation d'un rejet instantané et stationnaire dans la canopée urbaine.

### II.2.4.2. Canopée urbaine

Après avoir validé le modèle SIRANERISK par des mesures effectuées dans la couche limite atmosphérique, nous évaluons dans cette section sa capacité à reproduire la physique de la dispersion en milieu urbain, en comparant ses résultats numériques avec une deuxième série d'expériences en soufflerie.

#### II.2.4.2.1. Rejets stationnaires

Dans la première partie, nous nous intéressons aux simulations des rejets stationnaires dans un quartier idéalisé (expériences de Garbero et al. (2010)). La concentration dans la canopée urbaine est décrite dans SIRANERISK par le modèle d'advection (II.2.2.1.2), qui permet de fournir une valeur de concentration dans chaque tronçon de chaque rue (Lamaison et al., 2011a). Cette concentration variable le long de chaque rue permet une description plus fine que la concentration uniforme fournie par le modèle SIRANE. Les Figures II.2, II.23, II.24 et II.25 montrent un bon accord entre les résultats de SIRANERISK et les mesures en soufflerie. L'utilisation de ce nouveau modèle à boîtes instationnaires permet de réduire les erreurs d'estimation des concentrations à l'intérieur de la canopée pour les quatre directions du vent. Les coefficients de détermination  $R^2$  et les équations des droites d'ajustement des concentrations mesurées comparés à ceux calculés par SIRANERISK, illustrés dans les Figures II.22-d, II.23-d, II.24-d et II.25-d, sont bien meilleurs que ceux déterminés en utilisant les résultats du modèle SIRANE (II.1.6). L'utilisation de SIRANERISK permet donc d'améliorer les résultats pour les concentrations dans les rues, sans modifier la physique de la dispersion dans les rues latérales de la canopée urbaine. En effet, les panaches de polluants s'arrêtent aux mêmes endroits que ceux issus des résultats des simulations effectuées par SIRANE.

Les comparaisons des résultats de SIRANERISK sur d'autres essais en soufflerie utilisant d'autres configurations (B30 et B45) nous permettent de confirmer la fiabilité de ce modèle et sa capacité à bien reproduire les écoulements à l'intérieur (Figure II.26-a et Figure II.27-a) et à l'extérieur (Figure II.26-b et Figure II.27-b) de la canopée urbaine pour un rejet stationnaire. Bien que le décalage entre les résultats numériques de SIRANERISK et les mesures en soufflerie dans ces configurations soit légèrement plus élevé que celui des configurations précédentes, le modèle reste fiable et ses résultats sont assez satisfaisants puisque les coefficients de détermination sont toujours supérieurs à 0.80 (Figure II.26-c et Figure II.27-c).

Les Figures II.26-a et II.27-a présentent des comparaisons entre les concentrations calculées par SIRANERISK et celles mesurées en soufflerie à l'intérieur des rues suivant des profils transversaux et perpendiculaires à la direction du vent. Nous observons dans ces cas que les résultats de SIRANERISK sont parfois plus ou moins écartés des mesures. Ceci s'explique par la difficulté du modèle à reproduire parfaitement les phénomènes physiques produits par les recirculations singulières et par les petites structures turbulentes au voisinage des bâtiments. Dans ces situations, les points de mesures dans chaque rue sont assez proches des façades des bâtiments qui forment le quartier idéalisé. SIRANERISK réussit tout de même à reproduire toutes les expériences sans exception d'une

manière assez satisfaisante, en respectant les variations des niveaux de concentration en fonction de la distance à la source.

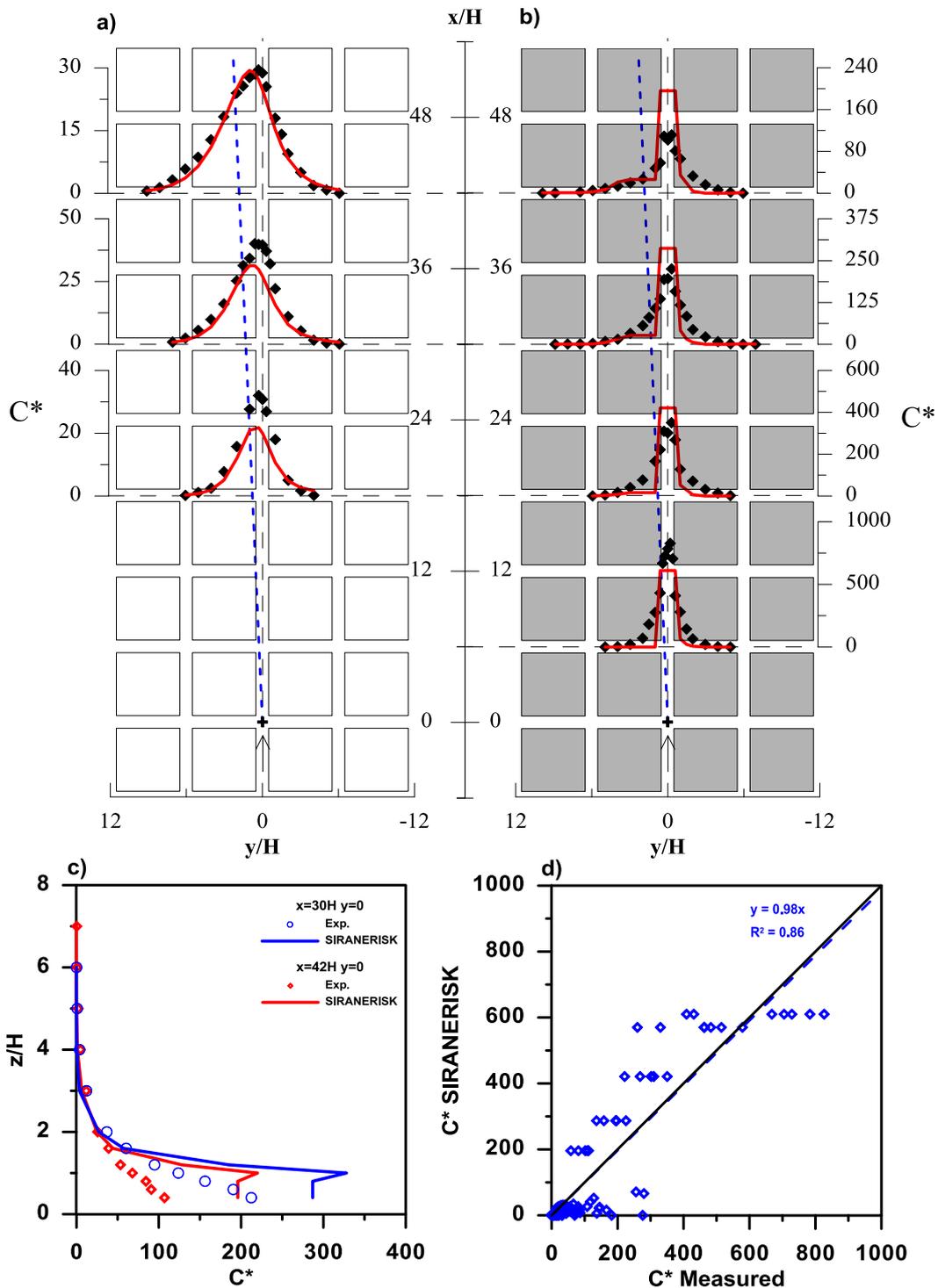


Figure II.22: Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta=2.5^\circ$ . Comparaison entre les profils expérimentaux mesurés en soufflerie (points noirs) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'extérieur de la canopée ( $z=2H$ ) (a) et au sein de la canopée ( $z=H/2$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source. (d) Comparaison globale entre les mesures et les résultats numériques.

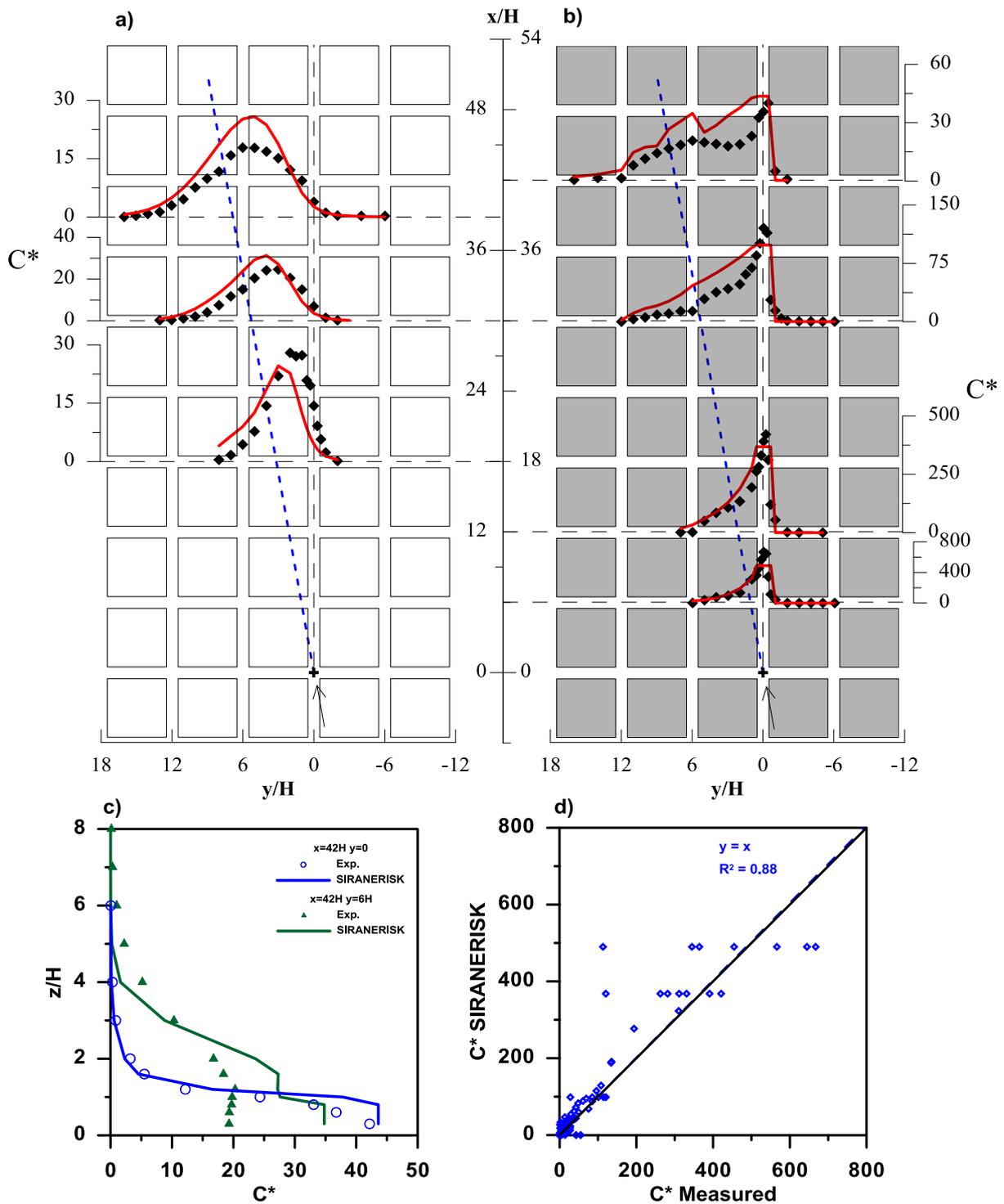


Figure II.23: Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta=10^\circ$ . Comparaison entre les profils expérimentaux mesurés en soufflerie (points noirs) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'extérieur de la canopée ( $z=2H$ ) (a) et au sein de la canopée ( $z=H/2$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source. (d) Comparaison globale entre les mesures et les résultats numériques.

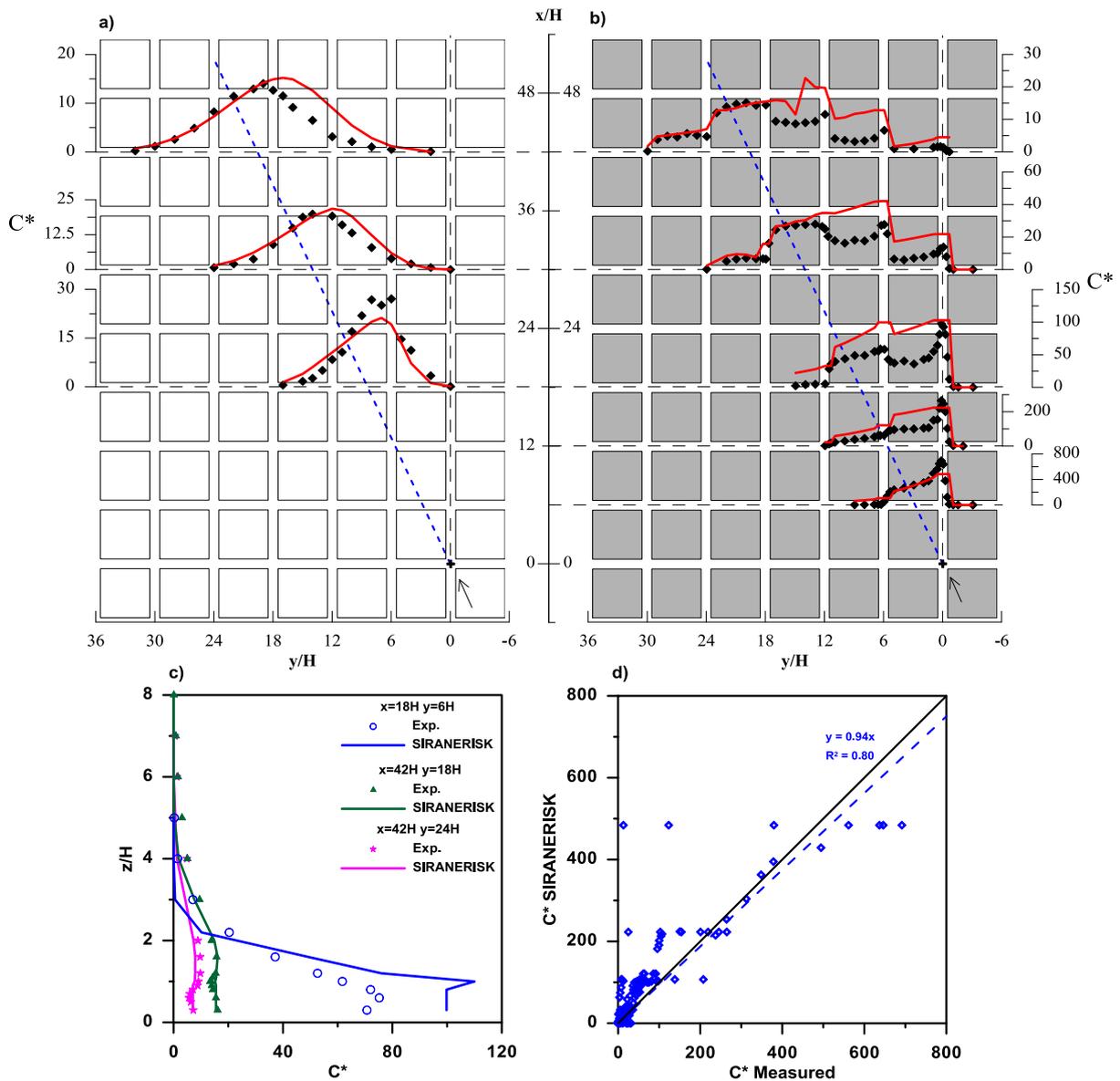


Figure II.24: Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta = 25^\circ$ . Comparaison entre les profils expérimentaux mesurés en soufflerie (points noirs) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'extérieur de la canopée ( $z=2H$ ) (a) et au sein de la canopée ( $z=H/2$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source. (d) Comparaison globale entre les mesures et les résultats numériques.

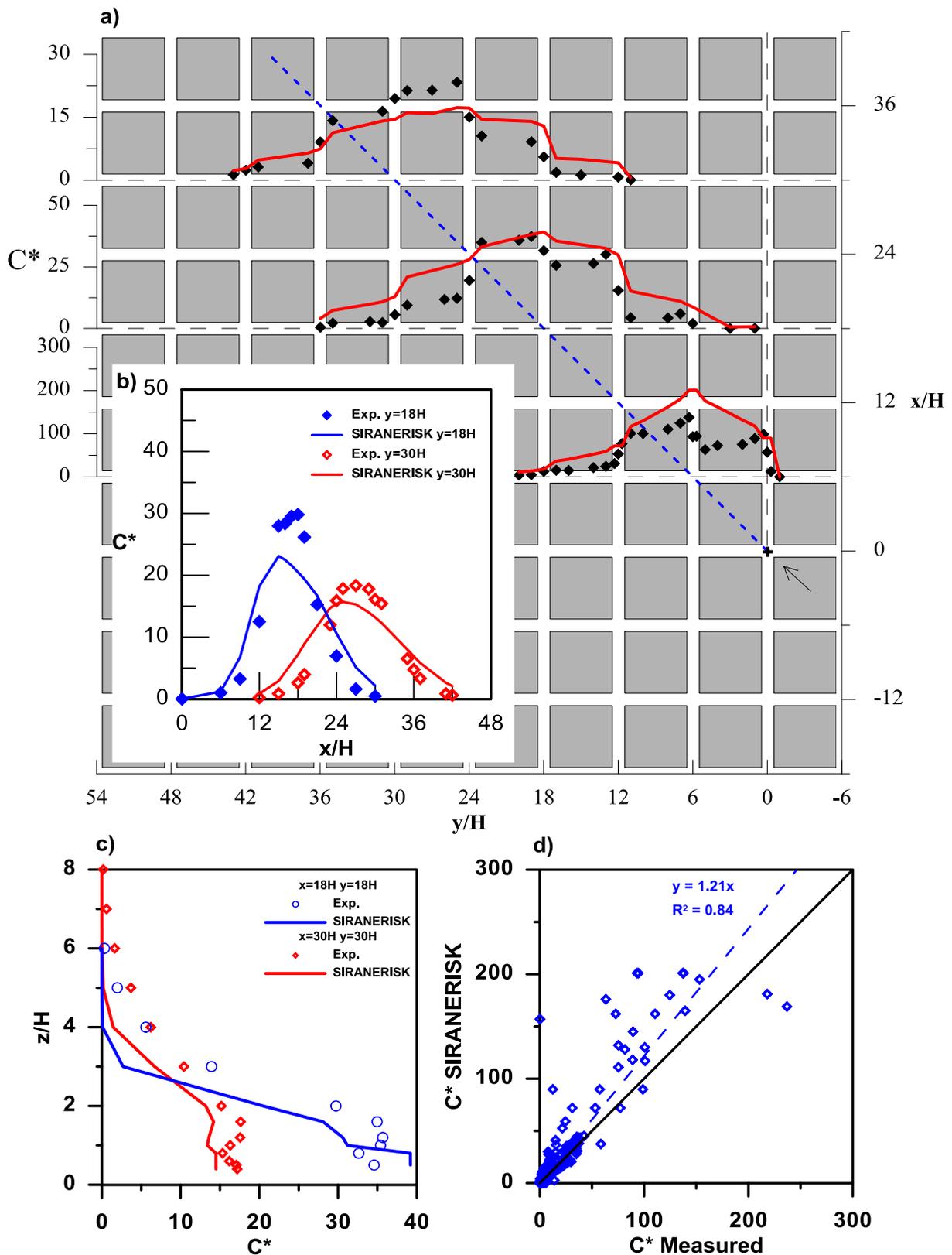


Figure II.25: Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta=47.5^\circ$ . Comparaison entre les profils expérimentaux (points noirs) mesurés en soufflerie (+) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'extérieur de la canopée ( $z=2H$ ) (a) et au sein de la canopée ( $z=H/2$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source. (d) Comparaison globale entre les mesures et les résultats numériques.

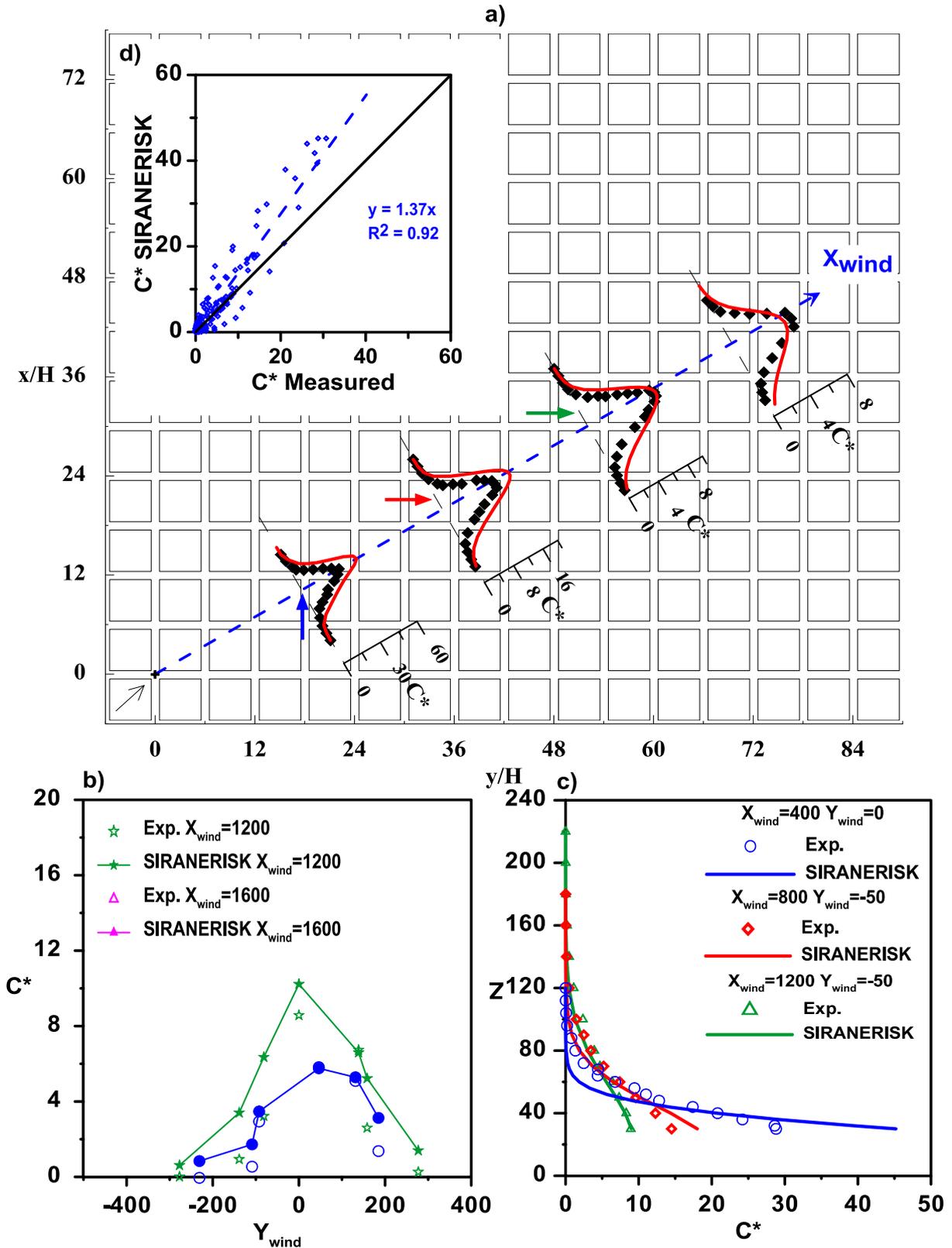


Figure II.26 Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta = 27.5^\circ$  (B30). Comparaison entre les profils expérimentaux mesurés en soufflerie (points noirs) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'intérieur ( $z = H/2$ ) (a) et à l'extérieur de la canopée ( $z = 2H$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source.

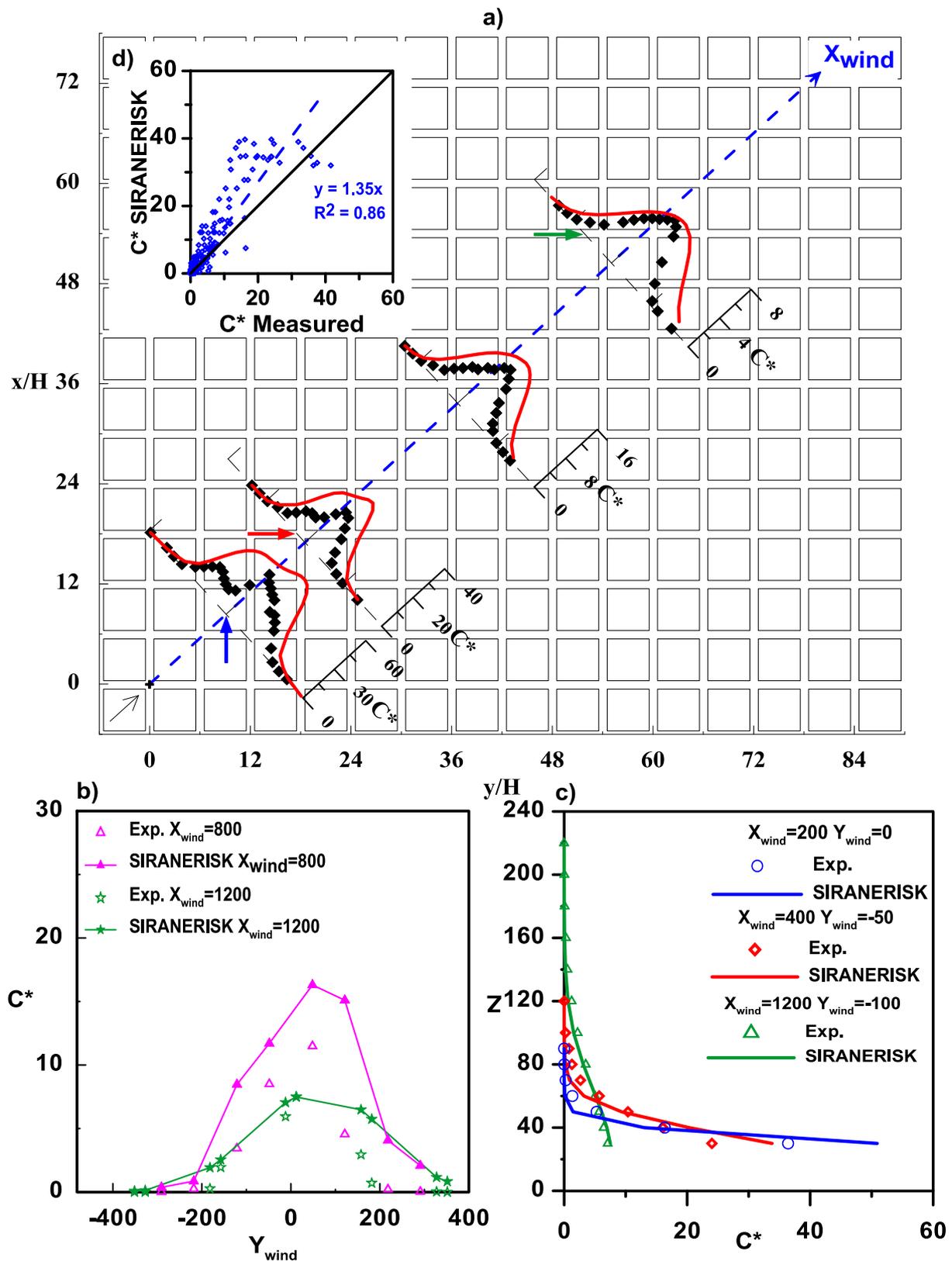


Figure II.27 Dispersion d'un panache dans un quartier pour  $\theta=47.5^\circ$ (B45). Comparaison entre les profils expérimentaux mesurés en soufflerie (points noirs) avec ceux fournis par le modèle SIRANERISK (ligne rouge) à l'intérieur ( $z=H/2$ ) (a) et à l'extérieur de la canopée ( $z=2H$ ) (b). (c) Comparaison entre les profils verticaux à différentes distances de la source.

### II.2.4.2.2. Rejets instationnaires

Dans cette deuxième partie, nous présentons quelques comparaisons entre le modèle SIRANERISK et les essais en soufflerie réalisés pour des rejets instationnaires de courte durée. Comme nous l'avons déjà présenté dans la section (II.2.3.2), nous utilisons des expériences en soufflerie réalisées par Cierco et Soulhac (2009b) avec une source identique à celle utilisée dans l'étude des rejets instationnaires sur sol rugueux. Nous étudions dans ce cas seulement deux directions du vent,  $27.5^\circ$  (configuration B30) et  $47.5^\circ$  (configuration B45), pour lesquelles la source est placée au centre de l'intersection de rues de coordonnées ( $X=0$  ;  $Y=0$ ) à une hauteur de 10m ( $Z=H/2$ ).

Comme dans le cas d'un sol rugueux, le rejet instationnaire a été réalisé 100 fois pour chaque point d'observation et les courbes d'évolution temporelle de la concentration ont été moyennées sur ces 100 réalisations. Le champ de concentration simulé avec SIRANERISK est illustré sur la Figure II.28 pour la configuration B30. On note l'étalement important du panache dans la direction de l'écoulement et l'effet de rétention dans la canopée que l'on peut observer longtemps après le déclenchement du rejet. Il est intéressant de remarquer que le temps de simulation permettant d'obtenir les résultats de la Figure II.28 est de 5 minutes sur un PC portable de bureau. Cela démontre la capacité du modèle SIRANERISK à simuler une situation complexe en un temps très limité.

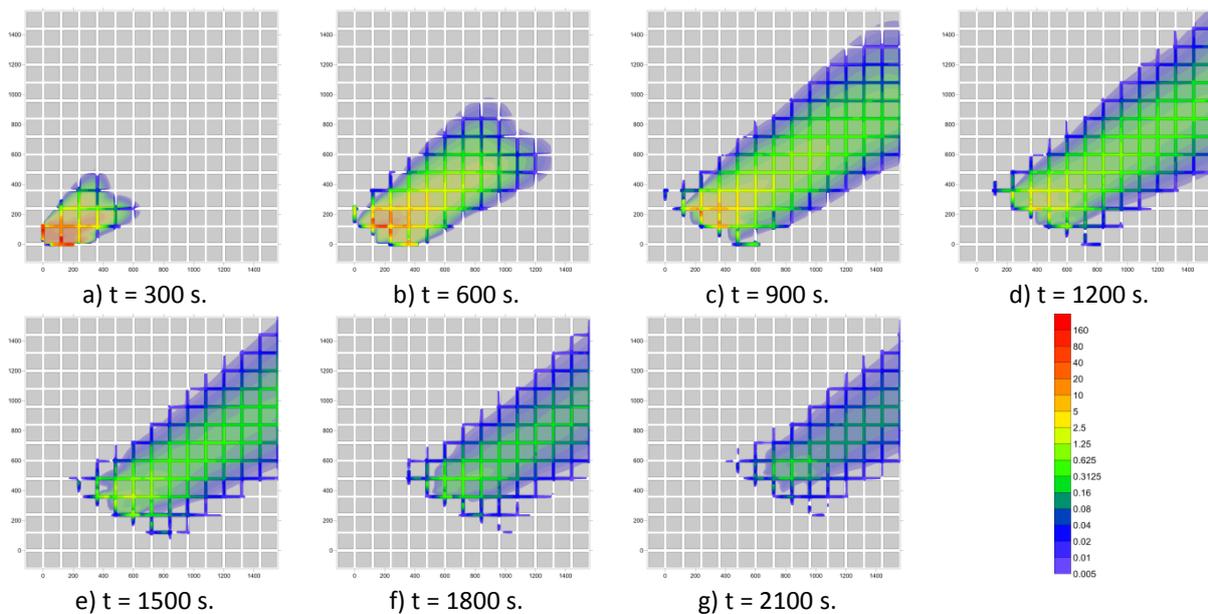


Figure II.28 : Champ de concentration adimensionnée  $C^* = C\delta^3/M$  à différents instants, pour une source ponctuelle placée en  $x = y = 0$ .

Nous présentons sur les Figures II.29, II.30, II.31 et II.32 les comparaisons des signaux temporels de concentration simulés numériquement par SIRANERISK et expérimentalement en soufflerie (Cierco et Soulhac, 2009a).

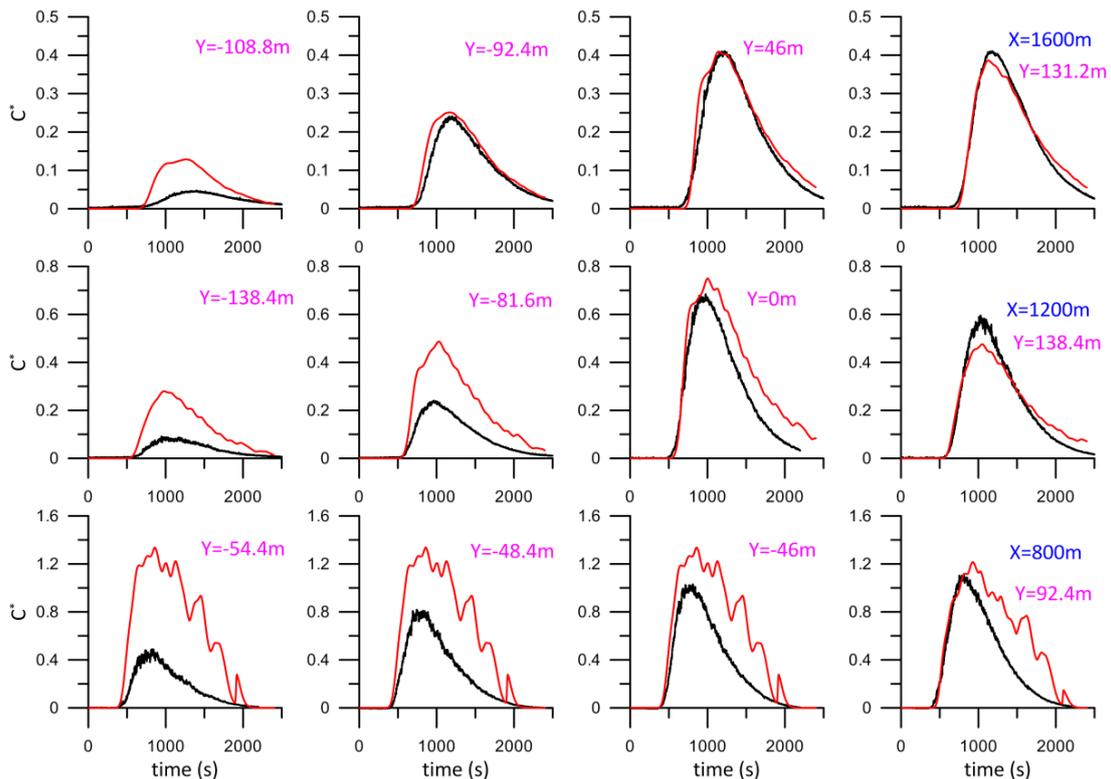


Figure II.29 : Configuration B30 :  $\varphi=30^\circ$  et  $z=H/2$ . Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle SIRANERISK (en rouge).

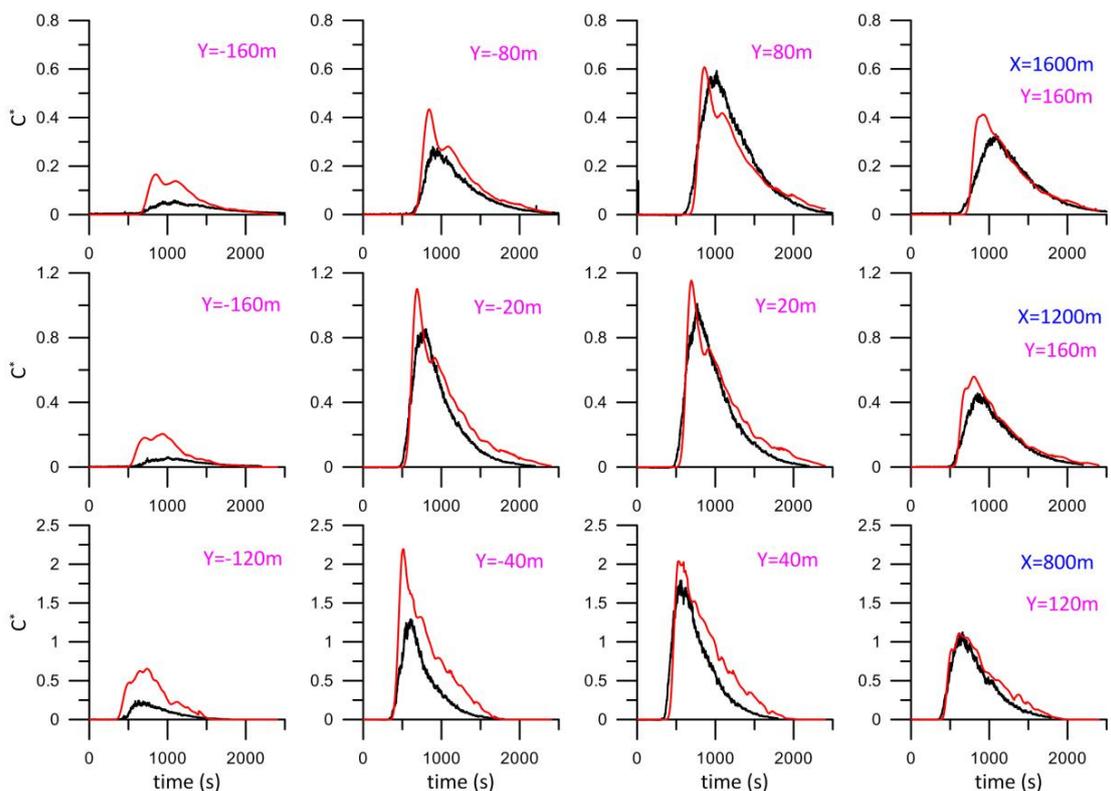


Figure II.30: Configuration B30 :  $\varphi=30^\circ$  et  $z=2H$ . Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle SIRANERISK (en rouge).

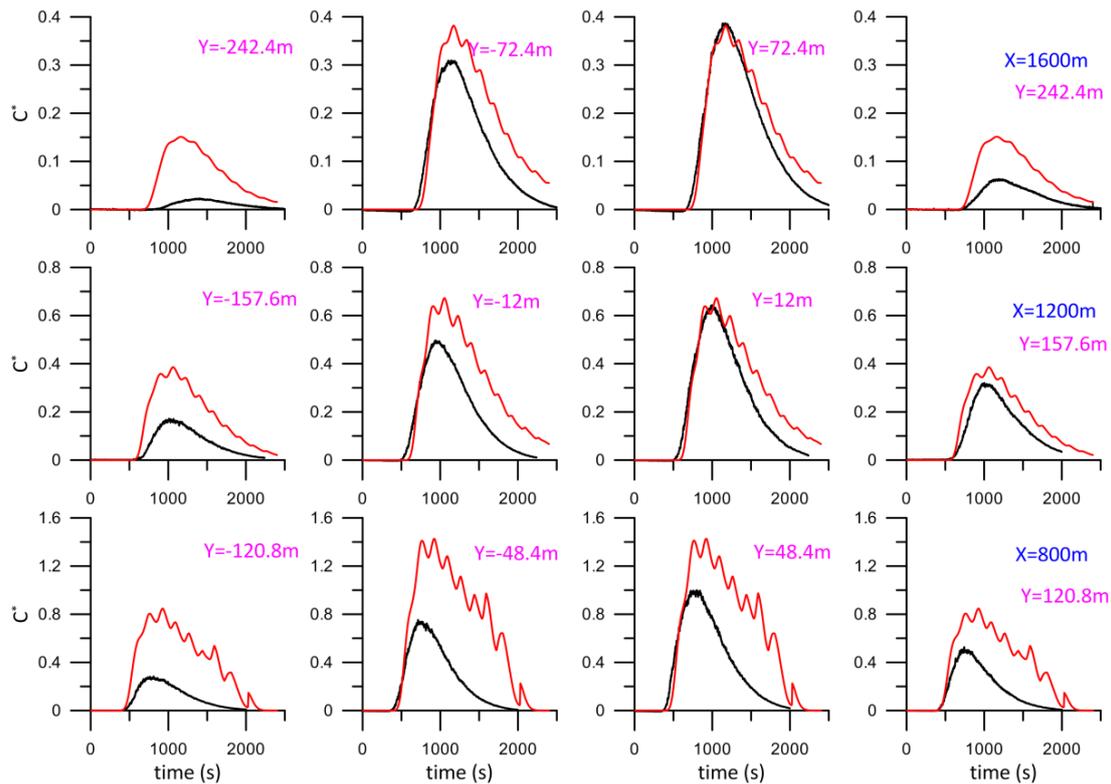


Figure II.31 : Configuration B45 :  $\varphi=45^\circ$  et  $z=H/2$ . Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle SIRANERISK (en rouge).

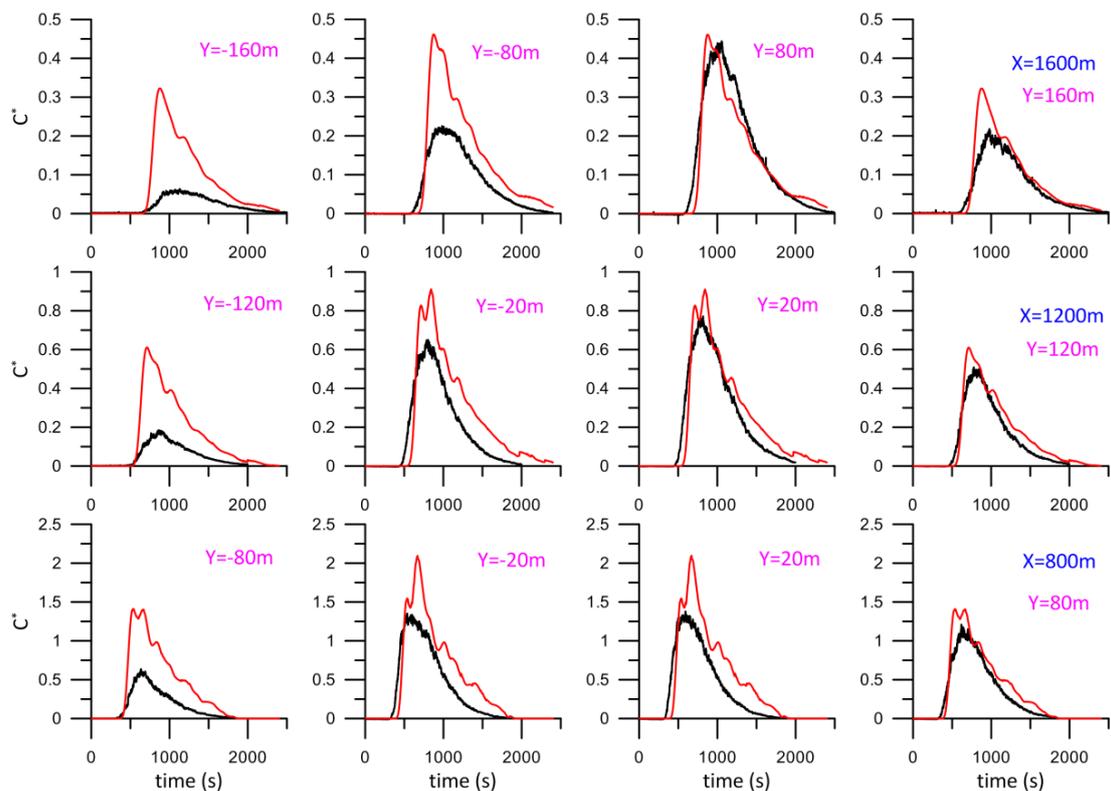


Figure II.32 : Configuration B45 :  $\varphi=45^\circ$  et  $z=2H$ . Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle SIRANERISK (en rouge).

Malgré certains décalages entre les mesures et les résultats numériques, nous observons que SIRANERISK réussit à reproduire les caractéristiques fondamentales d'un panache instationnaire tels que son temps d'advection donné par le temps d'arrivée du pic de concentration (Figure II.33-b), son étalement temporel et l'ordre de grandeur du maximum de concentration (Figure II.33-a) dans chaque signal temporel de concentration. Néanmoins, nous observons l'existence d'une grande variabilité dans les signaux numériques modélisés à l'intérieur de la canopée urbaine, en particulier à la distance de 800m de la source (Figure II.29 et Figure II.31). Cela peut être dû à une sous-estimation des mécanismes de diffusion interne à la canopée urbaine.

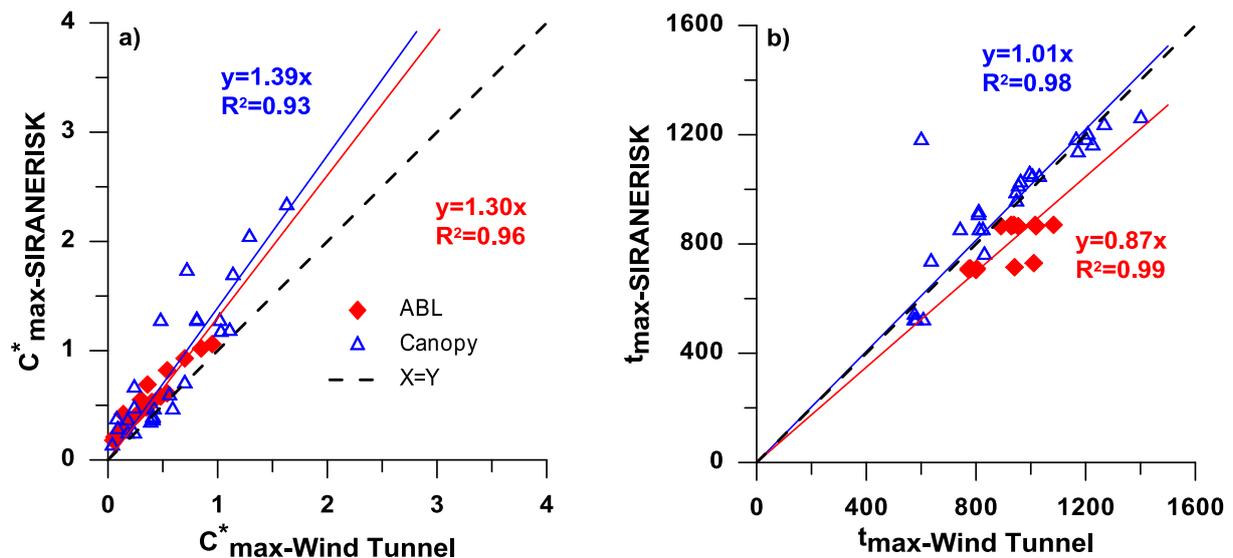


Figure II.33 : Droites d'ajustement entre les données expérimentales et les résultats de SIRANERISK à l'intérieur (en bleu) et au-dessus de la canopée urbaine (en rouge) pour la configuration B30. (a) Concentrations adimensionnées maximales et (b) temps d'advection.

## II.2.5. Conclusions

L'objectif de ce chapitre était de valider le modèle SIRANERISK dans des situations de dispersion au-dessus d'un sol rugueux et dans des situations de rejets de polluant à l'intérieur d'une canopée urbaine en utilisant des mesures effectuées dans la grande soufflerie de l'École Centrale de Lyon. Les simulations expérimentales utilisées contiennent à la fois des situations de référence connues et documentées tels que les expériences stationnaires de Garbero et al. (2010) dont le rejet est stationnaire et des situations nouvelles moins complètes comme les essais instationnaires de Cierco et Soulhac (2009a) et Cierco et Soulhac (2009b). Le traitement de la dispersion des rejets instationnaires en milieu urbain se fait dans le modèle SIRANERISK par l'intégration d'un modèle instationnaire de boîtes mobiles à l'intérieur de la canopée urbaine, couplé avec un modèle à bouffées gaussiennes généralisées pour la dispersion dans la couche limite atmosphérique.

Nous avons montré dans cette étude que l'effet de cisaillement est négligeable quand les rejets dans la couche limite sont stationnaires. En effet, les écarts entre les signaux temporels de concentration calculés en utilisant le modèle à bouffées cisillées et non cisillées sont assez réduits. Par contre, les effets de cisaillement sont beaucoup plus marqués dans le cas des rejets instantanés où les étalements et les valeurs des maximums des signaux temporels des concentrations adimensionnées sont significativement modifiés. Malgré certains décalages observés entre les profils expérimentaux et les profils calculés, on constate que le modèle SIRANERISK permet de reproduire

les principales caractéristiques du panache instationnaire telles que le temps d'advection (temps d'arrivée du maximum de concentration), l'étalement temporel du panache ou encore l'ordre de grandeur du maximum de concentration et sa variabilité spatiale.

D'autres travaux de recherche sont à envisager pour trouver une méthode opérationnelle de modélisation permettant de décrire la turbulence autrement que par la description statistique qui ne fournit que des moyennes sur un ensemble de réalisations possibles de l'écoulement.

## II.2.6. Références

- Anfossi, D., Tinarelli, G., Trini Castelli, S., Nibart, M., Olry, C., Commanay, J., 2010. A new Lagrangian particle model for the simulation of dense gas dispersion. *Atmos. Environ.* 44, 753–762.
- Batchelor, G.K., 1964. Diffusion from sources in a turbulent boundary layer. *Arch. Mech. Stosow.* 16, 261–270.
- Bianconi, R., Tamponi, M., 1993. A mathematical model of diffusion from a steady source of short duration in a finite mixing layer. *Atmospheric Environ. - Part Gen. Top.* 27 A, 781–792.
- Carruthers, D.J., Weng, W.S., Hunt, J.C.R., Holroyd, R.J., McHugh, C.A., Dyster, S.J., 2009. ADMS 4: Plume/Puff spread and mean concentration module specifications (No. P10/01V/09-P12/01V/09). CERC.
- Cermak, J.E., 1963. Lagrangian similarity hypothesis applied to diffusion in turbulent shear flow. *J. Fluid Mech.* 15, 49–64.
- Chatwin, P.C., 1968. The dispersion of a puff of passive contaminant in the constant stress region. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 94, 350–360.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., 2009a. Validation expérimentale en soufflerie du code de dispersion SIRANERISK – Transport et dispersion dans un écoulement de type couche limite. CEA-DAM, Bruyères le Châtel. 56p.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., 2009b. Validation expérimentale en soufflerie du code de dispersion SIRANERISK – Dispersion dans un quartier idéalisé. CEA-DAM, Bruyères le Châtel. 68p.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., 2009c. Validation expérimentale en soufflerie du code de dispersion atmosphérique SIRANERISK - Mise en oeuvre expérimentale.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., Méjean, P., Armand, P., Salizzoni, P., 2008. Determination of concentration fluctuations within an instantaneous puff through wind tunnel experiments, in: 12th Int. Conf. on Harmo. Within Atmos. Disp. Modell. for Regul. Purposes, Cavtat Croatia.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., Salizzoni, P., Méjean, P., Lamaison, G., Armand, P., 2012. Modelling concentration fluctuations for operational purposes. *Int. J. Environ. Pollut.* 48, 78–86.
- Csanady, G.T., 1972. Crosswind shear effects on atmospheric diffusion. *Atmospheric Environ.* 1967 6, 221–232.
- Davies, J.K.W., Hall, D.J., 1996. An analysis of some replicated wind tunnel experiments on instantaneously released heavy gas clouds dispersing over solid and crenellated fences. *J. Hazard. Mater.* 49, 311–328.
- Deardroff, J.W., Willis, G.E., 1975. A parametrisation of diffusion into the mixed layer. *J. Appl. Meteorol.* 14, 1451–1458.
- Dvore, D.S., Vaglio-Laurin, R., 1982. Atmospheric diffusion of small instantaneous point releases near the ground. *Atmos. Environ.* 16, 2791–2798.
- Ellison, T., 1957. Turbulent transport of heat and momentum from an infinite rough plane. *J. Fluid Mech.* 456–466.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2010. Experimental Study of Pollutant Dispersion Within a Network of Streets. *Bound.-Layer Meteorol.* 136, 457–487.
- Garratt, J.R., 1992. *The atmospheric boundary layer.* Cambridge University Press.
- Gifford, F.A., 1962. Diffusion in the diabatic surface layer. *J. Geophys. Res.* 67, 3207–3212.
- Hilderman, T., Wilson, D.J., 2008. Effect of Vertical Wind Shear on Concentration Fluctuation Statistics in a Point Source Plume. *Bound.-Layer Meteorol.* 129, 65–97.

- Hunt, J.C.R., Weber, A.H., 1979. A Lagrangian statistical analysis of diffusion from a ground-level source in a turbulent boundary layer. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 105, 423–443.
- Irwin, H.P.A.H., 1981. The design of spires for wind simulation. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 7, 361–366.
- Konopka, P., 1995. Analytical Gaussian Solutions for Anisotropic Diffusion in a Linear Shear Flow. *J. Non-Equilib. Thermodyn.* 20.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Armand, P., 2011. Presentation of siranerisk-2.0 – A decision-support oriented computational tool adapted to the dispersion of deleterious rbc agent in the urban atmospheric environment – Examples of application.
- MacDonald, R.W., Carter, S., Slawson, P.R., 2000. Measurements of mean velocity and turbulence statistics in simple obstacle arrays at 1:200 scale. University of Waterloo, Department of Mechanical Engineering.
- McQuaid, J., 1985. Heavy gas dispersion trials at Thorney Island: proceedings of a symposium held at the University of Sheffield, Great Britain, 3-5 April 1984. Elsevier.
- Meroney, R.N., Lohmeyer, A., 1984. Statistical characteristics of instantaneous dense gas clouds released in an atmospheric boundary-layer wind tunnel. *Bound.-Layer Meteorol.* 28, 1–22.
- Nickola, P.W., 1971. Measurements of the movement, concentration and dimensions of clouds resulting from instantaneous point sources. *J. Appl. Meteorol.* 10, 962–973.
- Nieuwstadt, F.T.M., Van Dop, H., 1982. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling. *Atmospheric Sci. Libr. Springer Neth.* 1.
- Palazzi, E., De Faveri, M., Fumarola, G., Ferraiolo, G., 1982. Diffusion from a steady source of short duration. *Atmospheric Environ.* 1967 16, 2785–2790.
- Robins, A., 2003. Wind tunnel dispersion modelling some recent and not so recent achievements. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 91, 1777–1790.
- Robins, A.G., Fackrell, J.E., 1998. Experimental study of the dispersion of short duration emissions in a turbulent boundary layer, in: *International Conference on Air Pollution - Proceedings.* pp. 697–707.
- Salizzoni, P., Marro, M., Soulhac, L., Grosjean, N., Perkins, R.J., 2011. Turbulent Transfer Between Street Canyons and the Overlying Atmospheric Boundary Layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 141, 393–414.
- Soulhac, L., 2000. Modélisation de la dispersion atmosphérique à l'intérieur de la canopée urbaine. Phd Thesis. Ecole Centrale de Lyon, Lyon.
- Soulhac, L., Garbero, V., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2009. Flow and dispersion in street intersections. *Atmos. Environ.* 43, 2981–2996.
- Soulhac, L., Perkins, R.J., Salizzoni, P., 2008. Flow in a street canyon for any external wind direction. *Bound.-Layer Meteorol.* 126, 365–388.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., 2010. Dispersion in a street canyon for a wind direction parallel to the street axis. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 98, 903–910.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. *Atmos. Environ.* 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2013. Parametric laws to model urban pollutant dispersion with a street network approach. *Atmos. Environ.* 67, 229–241.
- Sykes, R.I., Henn, D.S., 1995a. Representation of Velocity Gradient Effects in a Gaussian Puff Model. *J. Appl. Meteorol.* 34, 2715–2723.
- Sykes, R.I., Parker, S.F., Henn, D.S., Cerasoli, C.P., Santos, L.P., 1998. PC-SCIPUFF Version 1.2PD Technical documentation.
- Van Ulden, A.P., 1992. A surface-layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground. *Atmospheric Environ. Part Gen. Top.* 26, 681–692.
- Yee, E., Chan, R., Kosteniuk, P.R., Chandler, G.M., Biltoft, C.A., Bowers, J.F., 1994. Concentration fluctuation measurements in clouds released from a quasi-instantaneous point source in the atmospheric surface layer. *Bound.-Layer Meteorol.* 71, 341–373.

---

## **Troisième partie**

# **Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique**

---



## III.1. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique : Etat de l'art

---

*Ce chapitre expose une brève revue bibliographique donnant un aperçu global sur la théorie et la problématique de la modélisation inverse. Nous présentons dans ce chapitre les principales techniques et les méthodes les plus utilisées pour résoudre le problème inverse de la dispersion atmosphérique en citant à chaque fois leurs limites et les principaux travaux de recherche effectués pour remonter aux paramètres des sources de polluants atmosphériques.*

---

Etant donné que les méthodes inverses sont très variées, nous trouvons dans la littérature plusieurs types de classification qui rangent ces algorithmes en différentes catégories (méthodes directes, indirectes, itératives, déterministes, stochastiques...). Nous présentons dans la suite deux grandes familles de techniques qui sont largement utilisées dans l'identification des sources de pollution à partir des mesures de concentration dans l'atmosphère. Il s'agit des techniques d'assimilation de données et des méthodes d'optimisation et de régularisation, qui peuvent être déterministes ou hybrides.

### III.1.1. Méthodes d'Assimilation de données (AD)

D'une manière générale, les méthodes d'assimilation de données (AD) regroupent l'ensemble des techniques qui combinent les mesures (observations) avec les données calculées par les modèles de prévision afin d'obtenir de nouvelles estimations (des variables) plus proches de la réalité. Certaines techniques d'assimilation de données ont déjà montré de bons résultats pour estimer les variables d'état qui sont difficilement mesurables et quantifiables dans plusieurs domaines de recherche (en particulier la météorologie et l'océanographie), alors que d'autres méthodes d'AD ne sont pas encore réellement utilisées dans des applications pratiques et réelles (Denby et al., 2007).

Les méthodes d'assimilation de données ont récemment été considérées comme très utiles pour améliorer la qualité des résultats de prédiction des concentrations et des effets de la pollution atmosphérique (Eleveld et al., 2007; Rojas-Palma et al., 2003; Zheng et al., 2009). Elles permettent en particulier de contrôler les erreurs compensées dans les mesures de concentration (dues aux instruments de mesure et à leur mise en œuvre) et de réduire les erreurs des modèles de dispersion atmosphérique qui sont basés sur des approches simplifiées, incapables de reproduire toute la complexité des écoulements atmosphériques.

Bien que l'utilisation de ces méthodes était à la base destinée à améliorer les résultats des modèles directs de prévision, elles sont considérées depuis peu de temps comme des techniques d'inversion proprement dites (Bocquet, 2010; Ménard et al., 2004; Quélo et al., 2005). Le choix d'utilisation de chaque méthode d'AD reste cependant difficile et dépend essentiellement de la nature du modèle de prévision, de la qualité des observations et des ressources informatiques disponibles (Huang et Vedel, 2003). Pour cela, plusieurs études de recherche s'intéressent à étudier la performance de ces méthodes à reconstruire des sources de pollution atmosphérique en utilisant des données mesurées in-situ (Drews et al., 2005, 2004; Robertson et Langner, 2000) ou en soufflerie (Krysta et al., 2006).

Il existe deux grandes familles de méthodes d'assimilation de données : les méthodes séquentielles et les méthodes variationnelles ou rétrospectives (Anderson et al., 2000; Bouttier et

Courtier, 2002; Daget, 2008; Robert, 2004). Les méthodes séquentielles reposent sur la théorie de l'estimation statistique en corrigeant les paramètres d'entrée (paramètres d'état) dans le but d'obtenir un écart minimal avec la réalité (décrite avec approximation par les observations). Les méthodes variationnelles de l'assimilation de données sont formulées comme des problèmes d'optimisation en fixant une fonction coût (Gregg, 2008). Elles ont été utilisées pour la première fois par (Sasaki, 1955) en météorologie.

Pison (2005) définit les méthodes séquentielles comme des techniques d'AD qui prennent en compte les observations les unes après les autres dans l'ordre chronologique, alors que les méthodes variationnelles assimilent les données dans la fenêtre temporelle sur laquelle le problème inverse est traité.

L'objectif des méthodes d'assimilation de données est de rapprocher l'état vrai  $x^t$  d'un système (qui reflète la meilleure représentation possible de l'état vrai du système) en utilisant les observations  $y^o$  disponibles. Cela nécessite souvent une information a priori  $x^b$ , dite « ébauche », qui peut jouer le rôle d'un terme de régularisation dans des problèmes mal posés. L'état assimilé à partir des observations et de l'ébauche est dite état d'analyse  $x^a$ . Le problème d'analyse est fondé principalement sur la relation qui permet de relier les paramètres d'état et les grandeurs observées :

$$y^o = Hx^t + e^o \quad (\text{III.1-1})$$

où  $e^o$  est l'erreur de l'observation et  $H$  est l'opérateur d'observation qui peut englober le modèle physique dans certains problèmes. Il peut représenter par exemple le modèle de transformation et d'évolution physique des variables d'état.

Dans la suite, on utilisera les notations  $B$ ,  $A$  et  $R$  pour décrire respectivement les matrices de covariance d'erreurs d'ébauche ( $x^b - x^t$ ), d'analyse ( $x^a - x^t$ ) et d'observation ( $y^o - Hx^t$ ).

### III.1.1.1. Interpolation statistique optimale et analyse BLUE (Best Linear Unbiased Estimation)

L'interpolation statistique est une méthode assez simple à mettre en œuvre mathématiquement lorsqu'on a suffisamment d'observations (Daget, 2008). La portée de cette méthode est assez faible dans la mesure où sa mise en œuvre nécessite des observations assez proches des points d'analyse pour lesquels nous voulons estimer les paramètres en question (Bouttier et Courtier, 2002). Par ailleurs, il faut disposer d'une bonne sélection d'un nombre limité d'observations pour l'analyse. En effet, il est nécessaire de choisir un minimum d'observations pour réduire les dimensions du système (problème inverse) à résoudre.

L'interpolation statistique se fait par une unique analyse en intégrant la totalité des données disponibles (ébauche, erreurs, observations). Sous les conditions de linéarité de l'opérateur d'observation  $H$  ( $H(x^b - x^t) = Hx^b - Hx^t$ ) et pour des erreurs d'ébauche et d'observation non biaisées ( $E[(x^b - x^t)] = E[(y^o - Hx^t)] = 0$ ), l'état d'analyse  $x^a$  est estimé par la combinaison linéaire de nos connaissances a priori (ébauche)  $x^b$  et des observations  $y^o$ . L'objectif est de trouver la meilleure estimation de l'état d'analyse du système  $x^a$  en mettant à jour l'ébauche  $x^b$  :

$$x^a = x^b - K(y^o - Hx^b) \quad (\text{III.1-2})$$

où  $K$  est la matrice de gain et  $(y^o - Hx^b)$  est l'innovation qui décrit les écarts entre les mesures de concentration et les prévisions théoriques aux mêmes emplacements de récepteurs. Dans ce cas, la matrice de covariances d'erreur d'analyse s'écrit comme :

$$A = (I - KH)B(I - KH)^T + KRK^T \quad (\text{III.1-3})$$

A l'optimalité, l'interpolation statistique devient une interpolation optimale, dite aussi analyse BLUE (Best Linear Unbiased Estimator), dans laquelle on cherche à minimiser l'erreur d'analyse :

$$\frac{d(\text{Tr}(A))}{dK} = \frac{d\left(\left\| (x^a - x^t)(x^a - x^t)^T \right\|^2\right)}{dK} = 0 \quad (\text{III.1-4})$$

Dans ce cas, le gain optimal devient :

$$K = BH^T (HBH^T + R)^{-1} \quad (\text{III.1-5})$$

et la matrice de covariance d'erreur d'analyse  $A$  se simplifie :

$$A = (I - KH)B \quad (\text{III.1-6})$$

La solution par la méthode BLUE peut être obtenue d'une manière équivalente à une méthode variationnelle (Bocquet, 2009; Daget, 2007) dont la fonction coût à optimiser s'écrit :

$$J(x) = \frac{1}{2}(x - x^b)^T B^{-1}(x - x^b) + \frac{1}{2}(y^0 - Hx)^T R^{-1}(y^0 - Hx) \quad (\text{III.1-7})$$

Puisque les matrices  $B$  et  $R$  sont définies positives, cette fonctionnelle quadratique en  $x$  possède une solution unique, déterminée en annulant son gradient :

$$\nabla J(x) = B^{-1}(x - x^b) - H^T R^{-1}(y^0 - Hx) \quad (\text{III.1-8})$$

qui s'écrit sous la forme :

$$x = x^b + (B^{-1} + H^T R^{-1} H)^{-1} H^T R^{-1} (y^0 - Hx^b) \quad (\text{III.1-9})$$

L'analyse BLUE et l'interpolation optimale ont été utilisées par plusieurs chercheurs (Candiani et al., 2013; Messina et al., 2011; Tilloy et al., 2013; Wang et al., 2011; Wu et al., 2008) pour corriger les concentrations en polluants atmosphériques calculées par les modèles de dispersion à différentes échelles spatiales. Tilloy et al. (2013) ont montré une grande efficacité de la méthode BLUE à améliorer les champs de concentration à l'échelle locale. Wu et al. (2008) ont comparé la fiabilité de 4 méthodes différentes d'assimilation de données (interpolation optimale, filtre de Kalman, filtre de Kalman d'ensemble et méthode variationnelle à 4D). Cette comparaison a montré que la méthode d'interpolation optimale a la meilleure performance globale pour la prévision de la qualité de l'air.

La méthode BLUE peut être appliquée pour des problèmes inverses de dispersion atmosphérique mais elle nécessite souvent des moyens informatiques assez coûteux.

### III.1.1.2. Méthodes d'AD séquentielles

Les méthodes séquentielles sont basées principalement sur des techniques d'estimation purement statistiques dont chaque détermination se fait en temps réel en utilisant seulement les données observées dans le passé (les instants d'observation sont antérieurs à l'instant d'analyse). Ces méthodes consistent à effectuer des corrections successives des estimations à chaque nouvelle donnée disponible (Robert, 2004). Pour faciliter la mise en œuvre de cette méthode d'inversion dans la pratique, nous avons besoin d'informations a priori sur le terme source (comme la zone potentielle de localisation de la source) afin de réduire le temps de calcul (Liu et Zhai, 2007). Malheureusement, ces informations sur le terme source ne sont pas souvent disponibles dans les cas réels.

### III.1.1.2.1. Filtre de Kalman

Le filtre de Kalman (1960) est un algorithme itératif qui a été largement utilisé pour bien reproduire ou représenter un système physique qui admet un ou plusieurs paramètres d'état qui ne sont pas observables directement. Dans certaines conditions, il peut être considéré comme une analyse BLUE itérative dont chaque état analysé peut servir comme une ébauche pour l'étape suivante de l'analyse. Cet algorithme d'estimation permet de calculer les valeurs optimales d'une variable à l'état actuel en prenant en compte toutes les données disponibles dans le passé et en utilisant des modèles (observations, dynamiques) linéaires. Il s'agit d'une extension de la méthode d'interpolation optimale dont l'erreur de prévision évolue en fonction du temps. Contrairement à l'analyse BLUE, l'estimation utilisant le filtre de Kalman dépend des erreurs des instants précédents. En pratique, la covariance d'erreur dans le filtre de Kalman est spécifiée seulement à l'instant initial et évolue ensuite automatiquement en fonction du temps suivant l'algorithme. Cependant, le coût d'utilisation du filtre de Kalman peut être beaucoup plus lourd que la méthode variationnelle 4D-Var (4Dimensional VARIational) (Bouttier et Courtier, 2002).

Cette méthode d'assimilation de données a été largement utilisée dans le domaine de la dispersion atmosphérique, en particulier pour réduire les erreurs d'estimation des concentrations par rapport aux mesures observées en ajustant les paramètres d'entrée des modèles directs de dispersion atmosphérique (De Ridder et al., 2012; Zheng et al., 2010, 2009). De même, Jorquera et Castro (2010) et Mulholland et Seinfeld (1995) ont intégré un algorithme basé sur la théorie du filtre de Kalman à un modèle de photochimie pour ajuster les variations spatio-temporelles des inventaires d'émissions des sources de pollution de CO à l'échelle urbaine. Cette méthode repose sur un algorithme itératif de moindres carrés afin de respecter les observations (les mesures des concentrations) de façon optimale.

Pour d'autres utilisations proprement liées à la modélisation inverse, cet algorithme a été mis en œuvre par Drews et al. (2005) pour déterminer les paramètres de rejet d'une source radioactive en utilisant des mesures de concentration. Le lien entre les variables d'état (paramètres source) et les observations est assuré par une équation de mesure statistique qui joue le rôle du modèle direct de dispersion atmosphérique dans la modélisation inverse. Ces chercheurs ont montré que cette méthode rencontre des difficultés majeures pour estimer le terme source (grandes incertitudes d'estimation) lorsque les récepteurs ne sont pas parfaitement repartis sous la direction du vent. Pour d'autres essais, Drews et al. (2004) ont utilisé le même algorithme de filtre de Kalman en remplaçant le modèle statistique (qui assure le lien entre les observations et les paramètres de la source) par un modèle de panache gaussien. Par ailleurs, Hartley et Prinn (1993) ont étudié la possibilité de coupler la méthode de filtre de Kalman avec un modèle de transport atmosphérique tridimensionnel afin de déterminer les rejets industriels à l'échelle régionale. Ils ont montré que la qualité des résultats d'inversion dépend en grande partie de la fiabilité du modèle direct de dispersion utilisé.

La mise en œuvre numérique de cette méthode consiste à effectuer de manière itérative et successive deux étapes principales, après avoir initialisé toutes les variables nécessaires dans le calcul de la première itération, tels que l'opérateur d'observation  $H_0$ , la solution initiale  $x_0$  et la matrice de covariance d'erreur  $A_0$ . La première étape est l'étape d'analyse, dans laquelle l'algorithme estime la matrice de gain  $K_i$ , l'état d'analyse  $x_i^a$  et la matrice de covariance d'erreur d'analyse  $A_i$  à l'instant  $t_i$ . Ensuite, dans la deuxième étape de prévision, l'algorithme fournit une nouvelle estimation de l'état du système à l'instant  $t_{i+1}$  en utilisant le modèle d'évolution  $E$  :

$$x_{i+1}^a = E_{i \rightarrow i+1} \left( x_i^a \right) \quad (\text{III.1-10})$$

et calcule une autre matrice de covariance d'erreur d'analyse en utilisant la matrice de covariance d'erreur du modèle d'évolution  $Q$  :

$$B_{i+1} = E_{i \rightarrow i+1} A_i E_{i \rightarrow i+1}^T + Q_i \quad (\text{III.1-11})$$

Cette méthode exige que le problème soit de rang plein (Daget, 2007) puisque l'implémentation de cet algorithme repose sur le calcul de l'inverse de  $H$  à chaque itération. Dans le cas contraire, une méthode de régularisation sera nécessaire afin de conditionner cette matrice.

### III.1.1.2.2. Filtre de Kalman Etendu (FKE)

Le filtre de Kalman étendu est une version généralisée du filtre de Kalman classique. Il permet de traiter des problèmes avec un opérateur d'observation et un modèle de prédiction non linéaires. Cette méthode utilise la dérivée du modèle de prévision (dit modèle linéaire tangente) qui est souvent linéarisée au voisinage de la variable à analyser pour estimer une solution approchée et non optimale.

### III.1.1.2.3. Filtre de Kalman d'ensemble

Le filtre de Kalman d'ensemble est un filtre Gaussien proposé pour la première fois par Evensen (1994) et corrigé plus tard par Burgers et al., (1998). Son algorithme est capable de traiter des problèmes de grandes dimensions qui sont partiellement non linéaires. En effet, la linéarisation provoque souvent des problèmes de fermeture dans les équations d'évolution des covariances d'erreur (Robert, 2004). Cette alternative stochastique au filtre de Kalman classique a été considérée comme une méthode de Monte Carlo (Daget, 2008, 2007).

### III.1.1.3. Méthodes variationnelles

Les méthodes variationnelles d'assimilation de données sont également considérées comme des extensions de la méthode BLUE. Elles permettent de résoudre des problèmes dont les opérateurs d'observation et les modèles de prévision physiques ne sont pas forcément linéaires (Bocquet, 2009). Contrairement aux méthodes séquentielles, la prédiction des variables peut être effectuée en utilisant à la fois les observations qui précèdent (données du passé) et qui succèdent (données du futur) l'instant d'estimation, en assimilant les données sur une fenêtre temporelle. Ces techniques d'assimilation de données peuvent être classées en méthodes continues et méthodes discontinues (Bouttier et Courtier, 2002). Les méthodes continues sont généralement moins utilisées et plus difficiles à mettre en œuvre techniquement parce qu'elles font l'analyse sur une très longue fenêtre temporelle (période). Par contre, les méthodes discontinues ou intermittentes (Daget, 2008) discrétisent le temps d'analyse sur de petites fenêtres temporelles de calcul. La fonction coût à minimiser dans ces méthodes variationnelles est souvent définie comme la somme des résidus (écarts au carré) entre les prévisions des modèles directs et les observations (Rudd et al., 2012; Talagrand, 1997). Néanmoins, dans le cas général, cette fonctionnelle s'écrit comme la somme de deux termes dont le premier quantifie l'écart entre les sorties numériques des modèles et les observations  $J_o$  et le deuxième représente l'erreur à l'ébauche  $J_b$ .

$$J(x) = J_o(x) + J_b(x) \quad (\text{III.1-12})$$

L'estimation du minimum de cette fonction repose généralement sur le calcul du modèle adjoint de prévision qui permet de déterminer le maximum du gradient de la fonction objective à chaque itération.

Bien que les méthodes variationnelles d'assimilation de données aient été largement utilisées dans l'analyse et la prévision des paramètres d'état en météorologie et en océanographie (Daget, 2008; Robert, 2004), elles sont également utilisées depuis quelques années de manière

opérationnelle par plusieurs chercheurs pour reproduire les paramètres d'une source de pollution atmosphérique (Krysta et al., 2006; Meirink et al., 2008; Penenko, 2009; Quélo et al., 2005; Robertson et Langner, 1998; Robertson et Persson, 1993; Sasaki, 1955; Sportisse et Quélo, 2003; Wu et al., 2008). Par exemple, Krysta et al. (2006) ont utilisé une méthode variationnelle d'assimilation de données pour identifier les paramètres d'une source radioactive de pollution atmosphérique et les paramètres de turbulence à l'échelle locale. Cet algorithme consiste à minimiser l'écart entre la sortie d'un modèle de dispersion atmosphérique à bouffées gaussiennes et des mesures en soufflerie dans une fonction coût, en utilisant un algorithme d'optimisation basé sur la méthode d'optimisation de quasi-Newton. Un modèle adjoint (construit par le logiciel de différentiation automatique Odyssee développé par l'INRIA) a été utilisé pour calculer de manière efficace la dérivée de la fonction coût par rapport aux différents paramètres d'optimisation afin de garantir une bonne minimisation des écarts entre les mesures et la sortie du modèle numérique. Krysta et al. (2006) ont montré que le modèle à bouffées gaussiennes utilisé dans cette étude ne permet pas de reproduire les effets locaux de dispersion de la pollution atmosphérique entre les bâtiments parce qu'ils ont constaté que la mise en place des bâtiments sur le site crée un décalage entre les sorties du modèle et les mesures. Ces travaux succédaient aux travaux de Quélo et al. (2005) qui ont étudié la robustesse de la méthode variationnelle à reproduire le terme source radioactif à l'échelle locale, en utilisant un modèle de dispersion atmosphérique de type panache gaussien. De même, Robertson et Persson (1993) ont couplé une méthode variationnelle d'assimilation de données avec un modèle de dispersion atmosphérique Eulérien pour reconstruire les paramètres d'une source de pollution radioactive d'un rejet accidentel fictif en utilisant des observations synthétiques des concentrations.

#### III.1.1.3.1. Méthodes variationnelles 3D-Var

Le principe des méthodes 3D-Var (3Dimensional VARIational assimilation) dérive de celui de l'interpolation linéaire en résolvant le même type de fonction coût (eq. (III.1-7)). Cette méthode permet souvent de reformuler un problème de type moindres carrés sous la forme d'une fonction coût à minimiser itérativement (Bouttier et Courtier, 2002), afin de réduire l'écart entre les observations et les solutions numériques fournies par le modèle de prévision (Talagrand, 1997). Le critère d'arrêt de cet algorithme peut être déterminé en fixant un nombre d'itérations défini à l'avance, ou en minimisant la norme du gradient de la fonction coût jusqu'à atteindre un seuil prédéterminé.

Le gradient de la fonction coût dans ce cas est calculable (équations (III.1-8) et (III.1-9)). Contrairement à la méthode d'analyse BLUE et à la méthode d'interpolation optimale, l'analyse 3D-Var permet de résoudre des problèmes de plus grande dimension, dont les observations ne sont pas nécessairement voisines des points d'analyse. C'est pourquoi, elle a été largement appliquée à grande échelle (problème d'estimation des paramètres météorologiques).

#### III.1.1.3.2. Méthodes variationnelles 4D-Var

La méthode d'assimilation à quatre dimensions 4D-Var est une forme généralisée de l'algorithme 3D-Var dont les observations évoluent explicitement en fonction du temps. En effet, nous pouvons remarquer que le deuxième terme de la fonction coût (eq. (III.1-13)), qui présente l'écart entre le modèle de prévision et les observations, évolue en fonction du temps. Par contre le terme d'estimation des variables d'état de la méthode 3D-Var (terme à gauche) reste le même :

$$J(x) = \frac{1}{2} (x - x^b)^T B^{-1} (x - x^b) + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N (y_i^0 - H_i E_{t_0 \rightarrow t_i}(x))^T R_i^{-1} (y_i^0 - H_i E_{t_0 \rightarrow t_i}(x)) \quad (\text{III.1-13})$$

sachant que  $x_i = E_{t_0 \rightarrow t_i}(x)$  est l'évolution temporelle de l'état du système de l'instant  $t_0$  à  $t_i$ .

Cet algorithme ne détermine pas seulement l'état optimal à un instant donné, comme la méthode 3D-Var, mais il estime toute la trajectoire optimale sur une période donnée. La mise en œuvre de cette méthode nécessite généralement l'intégration et la formulation adjointe du modèle direct d'évolution. En fait, la minimisation de cette fonctionnelle se fait souvent par l'algorithme de descente de type gradient conjugué ou par une méthode de quasi-Newton qui nécessitent eux-mêmes le calcul de gradients.

La méthode 4D-Var est considérée comme plus sophistiquée que la méthode 3D-Var. Cependant, elle présente quelques inconvénients tels que la nécessité de mettre en place un modèle adjoint, difficile à formuler lorsque le modèle direct de prévision est complexe. Dans la pratique et pour des utilisations en temps réel, la mise en œuvre de cette méthode nécessite l'attente des observations sur la totalité de l'intervalle de temps de son application (Bouttier et Courtier, 2002). En effet, à un instant donné de simulation, la méthode 4D-Var utilise toutes les observations disponibles sur toute la période d'estimation (les observations passées et futures).

Bien que la mise en œuvre de ces techniques soit assez lourde (calcul de l'adjoint, méthode d'optimisation), elles sont largement utilisées en pratique et en particulier dans le domaine de la qualité de l'air à différentes échelles spatiales. Elbern et Schmidt (2001), Elbern et al. (2000), Meirink et al. (2008), Mendoza-Dominguez et Russell (2001) et Robertson et Persson (1993) ont utilisé la méthode variationnelle à quatre dimensions pour ajuster et/ou optimiser les inventaires et les taux d'émissions de la pollution atmosphérique. Ces travaux montrent que la méthode 4D-Var est un outil prometteur pour ajuster les inventaires d'émissions de plusieurs types de polluants. Meirink et al. (2008) ont aussi appliqué la méthode variationnelle 4D-Var pour estimer l'incertitude des émissions mensuelles de méthane dans l'atmosphère sur une fenêtre temporelle relativement longue (une année) afin d'améliorer nos connaissances sur le terme source. Pour des applications à la modélisation inverse de pollution atmosphérique, nous pouvons en particulier citer les travaux de Bocquet (2012) et Davoine et Bocquet (2007) qui estiment les émissions temporelles et déterminent la hauteur des sources de pollution radioactive suite à l'accident de Tchernobyl. La méthode d'inversion utilisée dans cette étude repose d'une part sur une formulation similaire à la méthode 4D-Var et d'autre part sur la méthode de régularisation d'entropie maximale

### III.1.1.3.3. Modélisation adjointe

La modélisation adjointe est une technique auxiliaire largement utilisée dans les études de sensibilité et dans l'application des méthodes inverses. Elle a été classée par Le Dimet et Talagrand (1986) comme une technique variationnelle de l'assimilation de données. Elle est généralement utilisée lorsque la minimisation de la fonctionnelle nécessite le calcul de la dérivée d'une fonction par rapport à plusieurs paramètres comme dans le cas de la méthode d'assimilation de données à quatre dimensions 4D-Var. L'utilisation de la formulation adjointe pour décrire la relation sources-récepteurs peut simplifier énormément le calcul et rend par la suite la méthode d'inversion plus opérationnelle du point de vue du temps de calcul et des ressources informatiques (Keats et al., 2007a).

Les solutions adjointes peuvent être estimées par des calculs approchés (utilisation des équations de rétro-panache) ou par des calculs automatiques (différentiation numérique) (Bocquet, 2007b). Les trois outils numériques de différentiation automatique suivants sont cités comme exemples. Le premier est « Odysée », développé à l'INRIA et présenté par Rostaing et al. (1993). Ce

modèle a été utilisé par Krysta et al. (2006) et Quélo et al. (2005) pour calculer l'adjoint des équations de transport des polluants dans l'atmosphère. Le deuxième outil, TAPENADE, est également développé à l'INRIA, dans le cadre du projet Tropics (Robert, 2004). Le dernier est le modèle de différenciation TAMC, présenté en détail par Giering et Kaminski (1998).

L'approche de la modélisation adjointe a été utilisée par plusieurs chercheurs (Hourdin et Issartel, 2000; Kaminski et al., 1999; Pudykiewicz, 1998; Vautard et al., 2000) pour traiter des problèmes d'inversion et d'estimation liés à la qualité de l'air. Müller et Stavrou (2005) ont couplé la méthode adjointe avec des observations satellitaires qui fournissent des images indiquant les concentrations en CO et NO<sub>2</sub> dans la troposphère dans le but d'estimer les émissions mondiales annuelles de CO et de NO<sub>2</sub> au sol.

### III.1.2. Autres techniques utilisées dans l'inversion

Au-delà des méthodes d'assimilation de données standards, il existe une grande diversité d'approches qui ont été appliquées pour résoudre des problèmes inverses de dispersion atmosphérique. Bien que ces techniques diffèrent par leurs concepts théoriques (stochastiques, déterministes, itératifs), par leurs applications (problèmes linéaires, problèmes mal posés, problèmes sous-déterminés,...), elles peuvent être couplées entre elles ou avec des méthodes d'assimilation de données pour simplifier le calcul ou compenser les erreurs d'estimation. Le choix d'utilisation de chaque méthode dépend souvent de la nature du problème à inverser, de sa formulation et de la précision des résultats souhaitée. Dans ce paragraphe, nous présentons quelques approches qui sont largement utilisées pour traiter des problèmes inverses, ou comme aide à la résolution de problèmes inverses, afin de reconstruire les paramètres d'une source de pollution atmosphérique.

#### III.1.2.1. Approche bayésienne et méthodes de Monte Carlo

Aujourd'hui, l'immense majorité des méthodes d'assimilation de données sont de type bayésien. Cette approche bayésienne permet de mettre à jour les croyances sur l'état du système étudié suite à l'acquisition d'une nouvelle information en appliquant la formule de Bayes :

$$p(S|C) = \frac{p(C|S) \times p(S)}{p(C)} \quad (\text{III.1-14})$$

où  $S$  est le terme source,  $C$  décrit les observations,  $p(S)$  décrit les connaissances a priori disponibles sur la source  $S$ ,  $p(C|S)$  est déterminée à partir du modèle de prévision physique et de l'opérateur d'observation et  $p(S|C)$  est associée à l'analyse a posteriori. A chaque itération, l'algorithme bayésien utilise ses estimations précédentes, comme une source d'information supplémentaire sur le problème, pour recalculer ses résultats dans la nouvelle estimation. L'objectif de cette méthode est de trouver la meilleure estimation du terme source  $S$  (débit d'émission et/ou localisation) en profitant des connaissances disponibles sur les observations  $C$  (mesures de concentration).

La méthode bayésienne a été largement utilisée pour identifier les sources de pollution atmosphérique (localisation et estimation du débit d'émission) aux échelles globales (Gurney et al., 2002; Politis et Robertson, 2004; Yee et al., 2008) et locales (Chow et al., 2008; Keats et al., 2007a; Yee et Flesch, 2010; Yee et al., 2008). Les paramètres de l'équation de Bayes (loi a posteriori, modèle de prévision) changent d'une étude à l'autre suivant la formulation et la nature des problèmes. Politis et Robertson (2004) et Keats et al. (2007a) ont utilisé l'adjoint de deux modèles de dispersion différents (respectivement Eulérien et Lagrangien) pour décrire la relation de transport source-récepteur. Pour d'autres applications, Yee et al. (2008) ont construit la fonction de vraisemblance

(relation source-récepteur) au moyen d'un modèle adjoint hybride reposant sur deux modèles de dispersion différents en même temps : Eulérien et Lagrangien. En fait, ils ont utilisé le même algorithme bayésien pour reconstruire à la fois les paramètres des sources à l'échelle globale (European Tracer Experiment) et à l'échelle locale (Joint Urban 2003).

Etant donné que les problèmes inverses relatifs à la pollution atmosphérique sont souvent assez complexes et de grandes dimensions, d'autres méthodes telles que celles de Monte Carlo ont été couplées avec l'algorithme bayésien pour faciliter la recherche des solutions. Les méthodes de Monte Carlo permettent de résoudre un problème mathématique complexe de grande dimension de manière itérative en mettant en œuvre des outils et des techniques d'échantillonnage aléatoire. Elles sont souvent destinées aux problèmes fortement non-linéaires ou multimodaux (Rondeau, 2007). L'intégration de ces techniques dans les algorithmes inverses peut être expliquée par leur rapidité.

Les méthodes de Monte Carlo sont appliquées dans plusieurs domaines des sciences de l'ingénieur comme les approches d'optimisation, les méthodes de calcul des intégrales ou comme les techniques d'échantillonnage de variables aléatoires. La famille qui est largement utilisée avec la méthode bayésienne dans la modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique est celle de « chaînes de Markov ». Ces dernières sont souvent employées pour extraire des critères intégraux des lois d'estimation a posteriori. Dans la pratique, les approches de chaînes de Markov se partagent en deux catégories d'algorithmes (classiques ou séquentiels) suivant la nature du problème à résoudre.

L'algorithme bayésien a été couplé plusieurs fois avec l'algorithme classique (Delle Monache et al., 2008; Galbally et al., 2009; Keats et al., 2007a, 2007b; Senocak et al., 2008) ou séquentiel (Johannesson et al., 2006) d'échantillonnage de « Markov Chain Monte Carlo » (MCMC) pour reconstruire les paramètres des sources de pollution atmosphérique. Delle Monache et al. (2008) ont montré que l'application de cette approche à l'échelle globale (continentale) permet d'identifier la position d'une source de pollution avec une incertitude de 100 km par rapport à la source réelle. Chow et al. (2008) ont testé le couplage de ces deux méthodes pour reconstruire les paramètres d'une source de pollution à l'échelle locale en utilisant un modèle de dispersion de type CFD et les essais de terrain de Joint Urban 2003. La même approche (méthode bayésienne avec MCMC) a été couplée dans d'autres études avec le modèle adjoint de l'équation de transport de pollution, pour reconstruire une source de pollution à l'échelle locale en milieu rural (Keats et al., 2007b) ou en milieu urbain complexe (Keats et al., 2007a; Lien et al., 2006). Ces chercheurs considèrent que l'utilisation des méthodes de MCMC permet d'éviter un temps de calcul exponentiel. Néanmoins, d'autres travaux de recherche (Senocak et al., 2008) ont montré que le couplage de cette approche (MCMC + méthode Bayésienne) avec un modèle gaussien de dispersion atmosphérique ne permet pas de reproduire une source de pollution dans un écoulement influencé par les effets individuels des bâtiments bien que la méthode bayésienne soit assez sophistiquée.

Par ailleurs, la méthode de Monte Carlo peut être considérée elle-même comme une méthode inverse. Cervone et Franzese (2010) ont utilisé la méthode de Monte Carlo de manière itérative pour reconstruire les paramètres d'une source de pollution atmosphérique en essayant de rapprocher les observations synthétiques calculées par un modèle gaussien de dispersion atmosphérique. Dans cette étude, les chercheurs ont testé plusieurs critères d'arrêt (fonctions coût) en étudiant la sensibilité de chacun à la taille du domaine et aux bruitages des observations synthétiques. L'idée était de trouver la meilleure fonction d'erreur à utiliser pour résoudre ce type de problèmes avec un algorithme de Monte Carlo. D'après Campillo et al. (2006), la plus grande difficulté dans la mise en œuvre numérique de cette méthode itérative résidait dans le choix des critères d'arrêt.

### III.1.2.2. Méthodes d'optimisation

Ces techniques sont considérées souvent comme des méthodes annexes dans la modélisation inverse. La plupart du temps, ces approches sont couplées avec d'autres méthodes inverses plus largement utilisées pour reconstruire les sources de pollution atmosphérique. Cependant, certains algorithmes d'optimisation ont été présentés comme des méthodes inverses en soi (Bady, 2013). Le choix de la méthode d'optimisation ou de régularisation à utiliser dépend généralement des besoins et du type de problème inverse à résoudre (linéaire, convexe, mal posé ou non, avec ou sans contraintes,...). Nous présentons dans ce paragraphe quelques méthodes largement utilisées pour reconstruire des sources de pollution atmosphérique.

Diverses méthodes d'optimisation ont été appliquées dans la modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique. Elles consistent à chercher la meilleure solution (position et débit) de manière « brutale » ou itérative, généralement en réduisant l'écart entre les concentrations mesurées et les prévisions théoriques d'un modèle de dispersion atmosphérique. McGrail (2001) a développé un algorithme inverse qui permet d'identifier les paramètres d'un modèle de convection-diffusion en utilisant trois méthodes d'optimisation différentes pour des problèmes non-linéaires : Levenberg-Marquardt, gradient conjugué et quasi-Newton. Bien que la méthode des gradients conjugués soit appropriée pour des problèmes de grandes dimensions (comme dans notre cas), la méthode de quasi-Newton est celle la plus couramment utilisée avec les algorithmes inverses (Krysta et al., 2006; Quélo et al., 2005; Rudd et al., 2012) pour optimiser la fonction coût posée. La mise en œuvre de ces méthodes dans la pratique nécessite le calcul du gradient de la fonctionnelle à optimiser. Cela pose un problème lorsque le système est fortement non-linéaire. Cependant, pour des problèmes purement linéaires (respectivement légèrement non linéaires), la matrice de gradient est égale directement à la transposée de la matrice (respectivement la transposée de la tangente linéaire) du modèle de transport. Akçelik et al. (2003) ont utilisé la méthode de Newton pour résoudre des systèmes non linéaires, mais ils ont appliqué en parallèle une méthode d'optimisation de type Karush-Kuhn-Tucker (KKT) avec une tolérance assez faible de l'ordre de  $10^{-6}$ .

D'autres méthodes d'optimisation considérées plus performantes, comme la méthode de recuit simulé et l'algorithme génétique, ont été utilisées dans ce même contexte (identifier une source de pollution atmosphérique). La méthode de recuit simulé, ou relaxation lente, permet de résoudre des problèmes d'optimisation assez complexes en fournissant directement la solution globale (minimum global). Elle est souvent adaptée à des problèmes d'optimisation de grande échelle, où la fonction coût à optimiser et les dimensions du système ne sont pas bien définies à l'avance (Press et al., 1992). Cette approche est loin d'être opérationnelle dans la pratique pour des simulations en temps réel puisqu'elle nécessite un temps de calcul très grand. Thomson et al. (2007) ont couplé un algorithme de recherche aléatoire combiné avec la méthode de recuit simulé pour localiser une source de gaz dans des milieux désertiques. Cet algorithme permet de détecter les sources d'éthane dans ces milieux et fournit une information indirecte sur la localisation des champs du pétrole. En effet, l'éthane qui s'échappe dans l'atmosphère est considéré comme un bon traceur des hydrocarbures existants dans le sous-sol (Hirst et al., 2004).

L'algorithme génétique d'optimisation est présenté pour la première fois par Holland (1975) comme un algorithme d'optimisation évolutionnaire<sup>1</sup>. Il a été bien développé par les chercheurs ces

---

<sup>1</sup> « Les algorithmes évolutionnaires sont des algorithmes d'optimisation s'appuyant sur des techniques dérivées de la génétique et de l'évolution naturelle : croisements, mutations... » (Durand, 2011)

dernières années et devient de plus en plus opérationnel et pratique pour résoudre tous les types de problèmes d'optimisation dans différents domaines de recherche. Cette méthode d'optimisation contient des approches pratiques, capables de traiter des systèmes de grandes dimensions dans un minimum de temps de calcul, en testant simultanément à chaque itération toute une population de solutions possibles du problème, choisies aléatoirement (Hüe, 1997). Les premières utilisations de cet algorithme pour identifier une source de pollution atmosphérique sont celles de Allen et al. (2007b), Cartwright et Harris (1993), Haupt (2005), Khlaifi (2007) et Khlaifi et al. (2009). La première étude portant plus en détail sur l'utilisation de cet algorithme dans des modélisations inverses réelles des sources de pollution, étudiant sa fiabilité et sa sensibilité par rapport à plusieurs paramètres, a été réalisée par Khlaifi (2007) et Khlaifi et al. (2009). Ils ont couplé la méthode d'optimisation génétique avec un modèle de dispersion gaussien afin de reconstruire les sources de pollution dans une zone industrielle en minimisant l'erreur entre les sorties du modèle théorique et les mesures horaires de concentration. L'étude de la performance de cette méthode a montré qu'elle était fortement sensible au champ de vent et à la position des récepteurs.

### III.1.2.3. Utilité de la régularisation

Dans la pratique, les problèmes inverses sont souvent mathématiquement mal posés ou mal conditionnés. La mauvaise qualité ou le manque d'observations peuvent provoquer des erreurs importantes d'estimation. De même, pour certains problèmes inverses mal conditionnés, les petites variations dans les paramètres peuvent provoquer de très grandes variations et des erreurs d'estimation des paramètres source (Enting, 2002). Pour cela, plusieurs études proposent d'autres algorithmes capables d'amortir ou de régulariser la marge d'erreur d'estimation. Pour cela, la très grande majorité des méthodes d'assimilation de données (et inverse en principe) utilise une régularisation. Par exemple, l'utilisation de la régularisation de Tikhonov (Tikhonov et Arsenin, 1977) ou de techniques de stabilisation (Lattes et Lions, 1969) permet d'imposer des limites sur la solution et de garantir la stabilité du système en ajoutant un nouveau terme dans la fonction coût. Skaggs et Kabala (1995) ont effectué une comparaison entre ces deux types de techniques et ont montré que la méthode Tikhonov est plus fiable et plus précise bien que les techniques de stabilisation soient plus faciles à mettre en œuvre. D'autres méthodes de régularisation (mise à part celle de Tikhonov) ont été développées pour stabiliser la recherche de solutions. Alifanov et al. (1995) ont mis en œuvre une méthode itérative pour stabiliser un problème inverse de transport thermique et Shenfelt et al. (2002) ont adopté l'algorithme SVD (utilisé dans notre algorithme d'inversion) comme une méthode de régularisation. Ainsi, la méthode bayésienne (décrite dans III.1.2.1) a été classée comme solution de régularisation pour résoudre les problèmes mal posés (Aster et al., 2005; Hazart et al., 2014).

Dans la mesure où les réseaux de surveillance de la qualité de l'air ne sont pas toujours bien conçus, les problèmes inverses d'identification des sources de pollution dans l'atmosphère sont assez souvent mal-posés. En effet, le nombre d'observations est souvent assez limité et les récepteurs sont très espacés. Dans ces situations, l'ajout d'un terme de régularisation comme celui de Tikhonov permet de changer la nature du problème mal posé (Akçelik et al., 2003). Cette méthode est aussi connue pour reconditionner une matrice et la rendre inversible en ajoutant une erreur très faible. Par exemple, Zhang et al. (2013) ont estimé les émissions gazeuses d'une source de pollution en couplant un modèle direct de type CFD avec un algorithme inverse basé sur la méthode d'optimisation des moindres carrés et la régularisation de Tikhonov. Ainsi, Thomson et al. (2007) présentent trois fonctions coûts différentes avec des termes de régularisation différents. Ces termes de régularisation ont été testés sur l'addition progressive de bruits aléatoires des observations de

concentration. Ces chercheurs ont prouvé que les meilleurs résultats sont obtenus en utilisant un critère de régularisation qui minimise les émissions totales de gaz. D'autre part, la méthode de maximum d'entropie développée par Bocquet (2005a et 2005b) a été considérée comme une méthode de régularisation parce qu'elle a réussi à résoudre des problèmes inverses fortement sous déterminés (Bocquet, 2007a). Cependant, l'application de cette approche nécessite des mesures de concentration assez proche de la source. De même, pour une position de source supposée connue, cette méthode fournit une sous-estimation de la quantité de masse de 15% par rapport à la quantité de masse réelle.

### III.1.3. Autres approches

Les méthodes décrites précédemment ne représentent pas une liste exhaustive des algorithmes appliqués pour reconstruire des sources de pollution atmosphérique. D'autres approches comme les méthodes probabilistes ne sont pas exposées dans cette revue bibliographique. Ces approches sont généralement des techniques qui permettent d'estimer la probabilité associée à un événement donné (Liu et Zhai, 2007) en se basant sur une description statistique entre les effets (concentration) et les causes (terme source) afin d'avoir une meilleure estimation des phénomènes physiques. Elles sont considérées comme les plus difficiles à mettre en œuvre dans la pratique parce qu'elles nécessitent des temps de calculs importants et des moyens informatiques performants pour des applications complexes. Cette technique a été utilisée par Ashbaugh et al. (1985) pour localiser et identifier les zones d'émissions potentielles de soufre. Son algorithme repose sur les mêmes principes que ceux de la méthode de rétro-panache. Ainsi, cette approche statistique de la relation rétro-panache a été appliquée à l'échelle globale par Stohl (1996) pour localiser des sources d'émissions de sulfate en Europe. D'autre part, les approches inverses dites directes (méthodes reposant sur la résolution analytique du problème inverse afin d'exprimer les paramètres à estimer en fonction d'autres connus) ne sont pas applicables dans notre cas étant donné la complexité de la résolution analytique de l'équation de transport de polluant.

Après avoir présenté les principales approches d'inversion utilisées pour identifier des sources de pollution atmosphérique, nous décrivons dans le chapitre suivant la formulation inverse adoptée et la méthode de résolution hybride développée dans cette étude.

### III.1.4. Références

- Akçelik, V., Biros, G., Ghattas, O., Long, K.R., Waanders, B. van B., 2003. A variational finite element method for source inversion for convective–diffusive transport. *Finite Elem. Anal. Des.* 39, 683–705.
- Alifanov, O.M., Artiukhin, E.A., Rumyantsev, E.S.V., 1995. *Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems*. Begell House.
- Allen, C.T., Young, G.S., Haupt, S.E., 2007. Improving pollutant source characterization by better estimating wind direction with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 41, 2283–2289.
- Anderson, L.A., Robinson, A.R., Lozano, C.J., 2000. Physical and biological modeling in the Gulf Stream region:: I. Data assimilation methodology. *Deep Sea Res. Part Oceanogr. Res. Pap.* 47, 1787–1827.
- Ashbaugh, L.L., Malm, W.C., Sadeh, W.Z., 1985. A residence time probability analysis of sulfur concentrations at grand Canyon National Park. *Atmospheric Environ.* 19, 1263–1270.
- Aster, R.C., Thurber, C.H., Borchers, B., 2005. *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Academic Press.
- Bady, M., 2013. *Fundamentals of Direct Inverse CFD Modeling to Detect Air Pollution Sources in Urban Areas*. *Comput. Water Energy Environ. Eng.* 02, 31–42.

- Bocquet, M., 2005a. Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. I: Theory. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131, 2191–2208.
- Bocquet, M., 2005b. Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. II: Applications. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131, 2209–2223.
- Bocquet, M., 2007a. Modélisation inverse et assimilation de données non-gaussiennes pour les traceurs atmosphériques : Application à ETEX, Algesiras et Tchernobyl. Habilitation à Diriger des Recherches.
- Bocquet, M., 2007b. High-resolution reconstruction of a tracer dispersion event: application to ETEX. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 133, 1013–1026.
- Bocquet, M., 2009. Introduction aux principes et méthodes de l'assimilation de données en géophysique. Notes de cours du Master de l'Ecole des Ponts ParisTech.
- Bocquet, M., 2010. Modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique accidentelle : progrès récents. *Pollut. Atmos.*
- Bocquet, M., 2012. Parameter-field estimation for atmospheric dispersion: application to the Chernobyl accident using 4D-Var. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 138, 664–681.
- Bouttier, F., Courtier, P., 2002. Data assimilation concepts and methods March 1999. *Meteorol. Train. Course Lect. Ser. ECMWF* 1–59.
- Campillo, F., Rakotozafy, R., Rossi, V., 2006. Analyse bayésienne de modèles markoviens d'évolution de ressources naturelles. Presented at the International African Conference on Research in Computer Science and Applied mathematics (CARI'06).
- Candiani, G., Carnevale, C., Finzi, G., Pisoni, E., Volta, M., 2013. A comparison of reanalysis techniques: Applying optimal interpolation and Ensemble Kalman Filtering to improve air quality monitoring at mesoscale. *Sci. Total Environ.* 458–460, 7–14.
- Cartwright, H.M., Harris, S.P., 1993. Analysis of the distribution of airborne pollution using genetic algorithms. *Atmospheric Environ. Part Gen. Top.* 27, 1783–1791.
- Cervone, G., Franzese, P., 2010. Monte Carlo source detection of atmospheric emissions and error functions analysis. *Comput. Geosci.* 36, 902–909.
- Chow, F.K., Kosović, B., Chan, S., 2008. Source Inversion for Contaminant Plume Dispersion in Urban Environments Using Building-Resolving Simulations. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 1553–1572.
- Daget, N., 2007. Revue des méthodes d'assimilation.
- Daget, N., 2008. Estimation d'ensemble des paramètres des covariances d'erreur d'ébauche dans un système d'assimilation variationnelle de données océaniques. Thèse de doctorat. Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier.
- Davoine, X., Bocquet, M., 2007. Inverse modelling-based reconstruction of the Chernobyl source term available for long-range transport. *Atmospheric Chem. Phys.* 7, 1549–1564.
- Delle Monache, L., Lundquist, J.K., Kosović, B., Johannesson, G., Dyer, K.M., Aines, R.D., Chow, F.K., Belles, R.D., Hanley, W.G., Larsen, S.C., Loosmore, G.A., Nitao, J.J., Sugiyama, G.A., Vogt, P.J., 2008. Bayesian Inference and Markov Chain Monte Carlo Sampling to Reconstruct a Contaminant Source on a Continental Scale. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 2600–2613.
- Denby, B., Kahnert, M., Brandt, J., Frydendall, J., Zlatev, Z., 2007. Development and application of data assimilation in regional scale atmospheric chemistry models (Rapport final No. 05FOX10). Nordic Council of Ministers.
- De Ridder, K., Kumar, U., Lauwaet, D., Blyth, L., Lefebvre, W., 2012. Kalman filter-based air quality forecast adjustment. *Atmos. Environ.* 50, 381–384. doi:10.1016/j.atmosenv.2012.01.032
- Dimet, F.-X.L., Talagrand, O., 1986. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects. *Tellus A* 38A, 97–110.
- Drews, M., Lauritzen, B., Madsen, H., 2005. Analysis of a Kalman Filter Based Method for on-Line Estimation of Atmospheric Dispersion Parameters Using Radiation Monitoring Data. *Radiat. Prot. Dosimetry* 113, 75–89.
- Drews, M., Lauritzen, B., Madsen, H., Smith, J.Q., 2004. Kalman filtration of radiation monitoring data from atmospheric dispersion of radioactive materials. *Radiat. Prot. Dosimetry* 111, 257–269.

- Elbern, H., Schmidt, H., 2001. Ozone episode analysis by four-dimensional variational chemistry data assimilation. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 106, 3569–3590.
- Elbern, H., Schmidt, H., Talagrand, O., Ebel, A., 2000. 4D-variational data assimilation with an adjoint air quality model for emission analysis. *Environ. Model. Softw.* 15, 539–548.
- Eleveld, H., Kok, Y.S., Twenhofel, C.J.W., 2007. Data assimilation, sensitivity and uncertainty analyses in the Dutch nuclear emergency management system: a pilot study. *Int. J. Emerg. Manag.* 4, 551.
- Enting, I.G., 2002. *Inverse problems in atmospheric constituent transport*. Cambridge University Press, Cambridge; New York.
- Evensen, G., 1994. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics. *J. Geophys. Res. Oceans* 99, 10143–10162.
- Galbally, D., Fidkowski, K., Willcox, K., Ghattas, O., 2009. Non-linear model reduction for uncertainty quantification in large-scale inverse problems. *Int. J. Numer. Methods Eng.* n/a–n/a.
- Giering, R., Kaminski, T., 1998. Recipes for Adjoint Code Construction. *ACM Trans Math Softw* 24, 437–474.
- Gregg, W.W., 2008. Assimilation of SeaWiFS ocean chlorophyll data into a three-dimensional global ocean model. *J. Mar. Syst.* 69, 205–225.
- Gurney, K.R., Law, R.M., Denning, A.S., Rayner, P.J., Baker, D., Bousquet, P., Bruhwiler, L., Chen, Y.-H., Ciais, P., Fan, S., Fung, I.Y., Gloor, M., Heimann, M., Higuchi, K., John, J., Maki, T., Maksyutov, S., Masarie, K., Peylin, P., Prather, M., Pak, B.C., Randerson, J., Sarmiento, J., Taguchi, S., Takahashi, T., Yuen, C.-W., 2002. Towards robust regional estimates of CO<sub>2</sub> sources and sinks using atmospheric transport models. *Nature* 415, 626–630.
- Hartley, D., Prinn, R., 1993. Feasibility of determining surface emissions of trace gases using an inverse method in a three-dimensional chemical transport model. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 98, 5183–5197.
- Haupt, S.E., 2005. A demonstration of coupled receptor/dispersion modeling with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 39, 7181–7189.
- Hazart, A., Giovannelli, J.-F., Dubost, S., Chatellier, L., 2014. Inverse transport problem of estimating point-like source using a Bayesian parametric method with MCMC. *Signal Process.* 96, Part B, 346–361.
- Hirst, B., Gibson, G., Gillespie, S., Archibald, I., Podlaha, O., Skeldon, K.D., Courtial, J., Monk, S., Padgett, M., 2004. Oil and gas prospecting by ultra-sensitive optical gas detection with inverse gas dispersion modelling. *Geophys. Res. Lett.* 31, n/a–n/a.
- Holland, J., 1975. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press.
- Hourdin, F., Issartel, J.-P., 2000. Sub-surface nuclear tests monitoring through the CTBT Xenon Network. *Geophys. Res. Lett.* 27, 2245–2248.
- Huang, X.-Y., Vedel, H., 2003. An introduction to data assimilation, in: *SAF Training Workshop: 2nd GRAS SAF User Workshop*, EUMETSAT, Darmstadt, Germany. pp. 25–37.
- Hüe, X., 1997. *Genetic Algorithms for Optimisation. Background and Applications*. (Technology Watch Report No. Version 1.0). The University of Edinburgh, Edinburgh Parallel Computing Centre.
- Johannesson, G., Dyer, K.M., Hanley, W.G., Kosovic, B., Larsen, S.C., Loosmore, G.A., Lundquist, J.K., Mirin, A.A., 2006. Sequential Monte-Carlo Framework for Dynamic Data-Driven Event Reconstruction for Atmospheric Release, in: *2006 IEEE Nonlinear Statistical Signal Processing Workshop*. Presented at the 2006 IEEE Nonlinear Statistical Signal Processing Workshop, pp. 144–147.
- Jorquera, H., Castro, J., 2010. Analysis of urban pollution episodes by inverse modeling. *Atmos. Environ.* 44, 42–54.
- Kalman, R.E., 1960. A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *J. Basic Eng.* 82, 35–45.
- Kaminski, T., Heimann, M., Giering, R., 1999. A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport: 2. Inversion of the transport of CO<sub>2</sub> in the 1980s. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 104, 18555–18581.

- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007a. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment. *Atmos. Environ.* 41, 465–479.
- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007b. Efficiently characterizing the origin and decay rate of a nonconservative scalar using probability theory. *Ecol. Model.* 205, 437–452.
- Khlaifi, A., 2007. Estimation des sources de pollution atmosphérique par modélisation inverse. Thèse de doctorat de l'Université de Paris XII. Université de Paris XII.
- Khlaifi, A., Ionescu, A., Candau, Y., 2009. Pollution source identification using a coupled diffusion model with a genetic algorithm. *Math. Comput. Simul.* 79, 3500–3510.
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Lattes, R., Lions, J.L., 1969. The method of quasi-reversibility; applications to partial differential equations, by R. Lattes and J.-L. Lions. Translated from the French ed. and edited by Richard Bellman, *Modern analytic and computational methods in science and mathematics*; 18. American Elsevier Pub. Co, New York.
- Lien, F.S., Yee, E., Ji, H., Keats, A., Hsieh, K.J., 2006. Application of CFD to Security Science: Progress on the Development of a High-Fidelity Numerical Model for Hazard Prediction and Assessment in the Urban Environment. *CFD Society of Canada Bulletin*#17 9–16.
- Liu, X., Zhai, Z., 2007. Inverse modeling methods for indoor airborne pollutant tracking: literature review and fundamentals: Indoor airborne pollutant tracking. *Indoor Air* 17, 419–438.
- McGrail, B.P., 2001. Inverse reactive transport simulator (INVERTS): an inverse model for contaminant transport with nonlinear adsorption and source terms. *Environ. Model. Softw.* 16, 711–723.
- Meirink, J.F., Bergamaschi, P., Krol, M.C., 2008. Four-dimensional variational data assimilation for inverse modelling of atmospheric methane emissions: Method and comparison with synthesis inversion. *Atmospheric Chem. Phys.* 8, 6341–6353.
- Ménard, R., Édouard, S., Houweling, S., Pétron, G., Granier, C., Reeves, C., 2004. Data Assimilation and Inverse Methods, in: Granier, C., Artaxo, P., Reeves, C.E. (Eds.), *Emissions of Atmospheric Trace Compounds, Advances in Global Change Research*. Springer Netherlands, pp. 477–515.
- Mendoza-Dominguez, A., Russell, A.G., 2001. Estimation of emission adjustments from the application of four-dimensional data assimilation to photochemical air quality modeling. *Atmos. Environ.* 35, 2879–2894.
- Messina, P., D'Isidoro, M., Maurizi, A., Fierli, F., 2011. Impact of assimilated observations on improving tropospheric ozone simulations. *Atmos. Environ.* 45, 6674–6681.
- Mulholland, M., Seinfeld, J.H., 1995. Inverse air pollution modelling of urban-scale carbon monoxide emissions. *Atmos. Environ.* 29, 497–516.
- Müller, J.-F., Stavrakou, T., 2005. Inversion of CO and NO<sub>x</sub> emissions using the adjoint of the IMAGES model. *Atmospheric Chem. Phys.* 5, 1157–1186.
- Penenko, V.V., 2009. Variational methods of data assimilation and inverse problems for studying the atmosphere, ocean, and environment. *Numer. Anal. Appl.* 2, 341–351.
- Pison, I., 2005. Modélisation inverse pour l'optimisation des sources primaires de pollution atmosphérique à l'échelle régionale. Université Paris XII Val de Marne.
- Politis, K., Robertson, L., 2004. Bayesian updating of atmospheric dispersion after a nuclear accident. *J. R. Stat. Soc. Ser. C Appl. Stat.* 53, 583–600.
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., 1992. *Numerical Recipes - The art of scientific computing*, 2nd Edition. ed. Cambridge University Press.
- Pudykiewicz, J.A., 1998. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters. *Atmos. Environ.* 32, 3039–3050.
- Quélo, D., Sportisse, B., Isnard, O., 2005. Data assimilation for short range atmospheric dispersion of radionuclides: a case study of second-order sensitivity. *J. Environ. Radioact.* 84, 393–408.
- Robert, C., 2004. Développement et comparaison de méthodes d'assimilation de données de rang réduit dans un modèle de circulation océanique : application à l'océan Pacifique Tropical. Université Joseph-Fourier - Grenoble I.

- Robertson, L., Langner, J., 1998. Source function estimate by means of variational data assimilation applied to the ETEX-I tracer experiment. *Atmos. Environ.* 32, 4219–4225.
- Robertson, L., Langner, J., 2000. On The Issue Of Quality Control In Data Assimilation, in: Gryning, S.-E., Batchvarova, E. (Eds.), *Air Pollution Modeling and Its Application XIII*. Springer US, pp. 299–309.
- Robertson, L., Persson, C., 1993. Attempts to Apply Four Dimensional Data Assimilation of Radiological Data Using the Adjoint Technique. *Radiat. Prot. Dosimetry* 50, 333–337.
- Rojas-Palma, C., Madsen, H., Gering, F., Puch, R., Turcanu, C., Astrup, P., Müller, H., Richter, K., Zheleznyak, M., Treebushny, D., Kolomeev, M., Kamaev, D., Wynn, H., 2003. Data assimilation in the decision support system rodos. *Radiat. Prot. Dosimetry* 104, 31–40.
- Rondeau, X., 2007. *Imagerie à travers la turbulence: mesure inverse du front d'onde et centrage optimal*. Université Claude Bernard-Lyon I.
- Rostaing, N., Dalmas, S., Galligo, A., 1993. Automatic differentiation in Odyssee. *Tellus A* 45, 558–568.
- Rudd, A.C., Robins, A.G., Lepley, J.J., Belcher, S.E., 2012. An Inverse Method for Determining Source Characteristics for Emergency Response Applications. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 1–20.
- Sasaki, Y.K., 1955. A fundamental study of the numerical prediction based on the variational principle. *J Meteor Soc Jpn.* 33, 262–275.
- Senocak, I., Hengartner, N.W., Short, M.B., Daniel, W.B., 2008. Stochastic event reconstruction of atmospheric contaminant dispersion using Bayesian inference. *Atmos. Environ.* 42, 7718–7727.
- Shenefelt, J.R., Luck, R., Taylor, R.P., Berry, J.T., 2002. Solution to inverse heat conduction problems employing singular value decomposition and model-reduction. *Int. J. Heat Mass Transf.* 45, 67–74.
- Skaggs, T.H., Kabala, Z.J., 1995. Recovering the History of a Groundwater Contaminant Plume: Method of Quasi-Reversibility. *Water Resour. Res.* 31, 2669–2673.
- Sportisse, B., Quélo, D., 2003. Data assimilation and inverse modeling of atmospheric chemistry. *Proc Indian Natl. Sci. Acad. Part Phys. Sci.* 69.
- Stohl, A., 1996. Trajectory statistics-A new method to establish source-receptor relationships of air pollutants and its application to the transport of particulate sulfate in Europe. *Atmos. Environ.* 30, 579–587.
- Talagrand, O., 1997. Assimilation of observations, an introduction. *J. Meteorol. Soc. Jpn.* 75, 191–209.
- Thomson, L.C., Hirst, B., Gibson, G., Gillespie, S., Jonathan, P., Skeldon, K.D., Padgett, M.J., 2007. An improved algorithm for locating a gas source using inverse methods. *Atmos. Environ.* 41, 1128–1134.
- Tikhonov, A.N., Arsenin, V.Y., 1977. *Solutions of Ill-posed Problems.*, Translation Edition. ed. Halsted Press Book, Washington, DC.
- Tilloy, A., Mallet, V., Poulet, D., Pesin, C., Brocheton, F., 2013. BLUE-based NO<sub>2</sub> data assimilation at urban scale. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 118, 2031–2040. doi:10.1002/jgrd.50233
- Vautard, R., Beekmann, M., Menut, L., 2000. Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling. *Environ. Model. Softw.* 15, 703–709.
- Wang, X., Mallet, V., Berroir, J.-P., Herlin, I., 2011. Assimilation of OMI NO<sub>2</sub> retrievals into a regional chemistry-transport model for improving air quality forecasts over Europe. *Atmos. Environ.* 45, 485–492.
- Wu, L., Mallet, V., Bocquet, M., Sportisse, B., 2008. A comparison study of data assimilation algorithms for ozone forecasts. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 113, D20310.
- Yee, E., Flesch, T.K., 2010. Inference of emission rates from multiple sources using Bayesian probability theory. *J. Environ. Monit. JEM* 12, 622–634. doi:10.1039/b916954g
- Yee, E., Lien, F.-S., Keats, A., D'Amours, R., 2008. Bayesian inversion of concentration data: Source reconstruction in the adjoint representation of atmospheric diffusion. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 96, 1805–1816.
- Zhang, T. (Tim), Yin, S., Wang, S., 2013. An inverse method based on CFD to quantify the temporal release rate of a continuously released pollutant source. *Atmos. Environ.* 77, 62–77. 7

- Zheng, D.Q., Leung, J.K.C., Lee, B.Y., 2009. Online update of model state and parameters of a Monte Carlo atmospheric dispersion model by using ensemble Kalman filter. *Atmos. Environ.* 43, 2005–2011.
- Zheng, D.Q., Leung, J.K.C., Lee, B.Y., 2010. An ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation: Application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 44, 1699–1705.



## **III.2. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique : Algorithme de recherche du débit d'une source de position connue**

---

*Ce chapitre est consacré à la présentation de la méthode inverse développée pour remonter aux débits d'émission des sources de pollution atmosphérique de position connue. Nous présentons tout d'abord la formulation linéaire du problème inverse de transport des polluants. Puis nous exposons l'algorithme mathématique adopté dans cette étude pour résoudre le problème inverse et déterminer l'évolution temporelle des émissions des sources. Enfin, nous étudions la sensibilité du système de modélisation inverse aux variations de plusieurs paramètres tels que la position des récepteurs par rapport à la source, la direction du vent ou les erreurs d'observations.*

---

### **III.2.1. Généralités**

L'algorithme présenté dans cette étude repose sur une formulation linéaire du problème inverse en profitant de la linéarité qui relie les concentrations mesurées aux émissions des sources de pollution. Le traitement du problème est effectué suivant les dimensions et la nature du système inverse (sous-déterminé, surdéterminé,...). La méthode utilisée a été classée comme un cas particulier d'une méthode variationnelle d'assimilation de données (Bocquet, 2010; Jeong et al., 2005). Il s'agit en grande partie d'un problème de moindres carrés dont l'objectif est de minimiser l'écart entre les mesures de concentration et les résultats théoriques du modèle direct de dispersion atmosphérique. Ces méthodes de moindres carrés ont été largement utilisées depuis les années soixante pour inverser des problèmes géophysiques et météorologiques (Askan et al., 2010; Backus et Gilbert, 1967; Kanasewich et Chiu, 1985; Lewis et Derber, 1985; Lewis et al., 2006; Lines et Treitel, 1984; Richardson et Zandt, 2009). De même, ces techniques ont été assez utilisées dans les dernières décennies pour identifier des sources de pollution atmosphérique (Issartel et al., 2012; Jeong et al., 2005; Krysta et al., 2006; Lushi et Stockie, 2010; Roussel et al., 2000; Sharan et al., 2012; Singh et al., 2013). La méthode de résolution de ce problème de moindres carrés a souvent été couplée avec d'autres méthodes d'optimisation pour traiter les cas où le système est mal posé ou mal défini. Les chercheurs utilisent généralement des méthodes d'optimisation itératives telles que celles de quasi-Newton (Krysta et al., 2006; Rudd et al., 2012), de gradient conjugué et de Levenberg-Marquard (présentées dans la section III.1.2.3) qui nécessitent généralement un bon choix de critères d'arrêt et des informations a priori sur le terme source. Cependant, vu que les données a priori sont généralement indisponibles dans ce type de problèmes (accidents industriels, attentats,...), nous avons adopté d'autres algorithmes de résolution et d'optimisation en changeant automatiquement la formulation du problème suivant la nécessité et la disponibilité de données.

Dans ce chapitre, nous présentons dans un premier temps, la philosophie générale adoptée pour résoudre un problème inverse linéaire en supposant que la position de la source est connue. Cet algorithme ne repose pas sur une seule méthode d'inversion ou une seule méthode d'optimisation. Il est constitué lui-même de plusieurs sous-algorithmes interconnectés suivant les besoins (suivant la nature du problème final après l'optimisation et la réduction des dimensions du système). Nous décrivons ensuite, les principales méthodes d'optimisation implémentées pour résoudre ce problème. Enfin, nous testons la sensibilité de cet algorithme aux paramètres d'entrée

en utilisant des observations synthétiques fournies par des modèles directs de dispersion atmosphérique, comme présenté par Allen et al. (2007) et Cervone et Franzese (2010).

### III.2.2. Formulation du problème inverse de dispersion atmosphérique

Nous proposons ici une formulation générique d'un problème inverse de dispersion atmosphérique. Le système d'équations formé par la suite sera valable en utilisant toutes les catégories de modèles de dispersion atmosphérique parce que nous nous sommes basés sur l'hypothèse de la linéarité des processus de dispersion par rapport aux débits d'émission, qui est valable pour tous les modèles de dispersion où les polluants sont supposés inertes chimiquement et sans effet dynamique ou thermique susceptible de modifier l'écoulement.

#### III.2.2.1. Description et formulation du problème

Pour formuler le problème inverse, nous sommes partis de la forme générale de l'équation d'advection-diffusion en 3D :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \cdot \nabla c = D \Delta c + R + Q \quad (\text{III.2-1})$$

Sachant que  $c(x,y,z,t)$  est la concentration qui correspond aux émissions  $Q$  de la source  $S(x_s, y_s, z_s, t)$  au point  $M(x,y,z)$  à l'instant  $t$ ,  $u$  est la vitesse du vent,  $D$  est le coefficient de diffusion moléculaire et  $R$  représente le terme de production ou de destruction chimique ou nucléaire. Comme le mouvement du fluide porteur de polluant est turbulent dans l'atmosphère, il est intéressant d'utiliser une décomposition des variables comme la somme d'un terme moyen (au sens de Reynolds) et d'un terme fluctuant :

$$\begin{cases} u = U + u' \\ c = C + c' \end{cases} \quad (\text{III.2-2})$$

En introduisant cette décomposition de Reynolds dans l'équation (III.2-1) et en appliquant l'opérateur de moyenne de Reynolds, on obtient :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = -\nabla J_c + D \Delta C + R + Q \quad (\text{III.2-3})$$

où  $J_c = (\overline{u'c'}; \overline{v'c'}; \overline{w'c'})^t$  représente la diffusion due aux flux turbulents.

Nous observons d'après l'équation (III.2-3) que la linéarité entre la concentration  $C$  et le débit de la source  $Q$  n'est pas vérifiée que sous les deux hypothèses suivantes :

- Modéliser la diffusion turbulente par une relation par rapport à la concentration. On utilise généralement l'hypothèse de Boussinesq de fermeture au premier ordre :

$$J_{c_i} = -K \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (\text{III.2-4})$$

où  $K$  est le coefficient de diffusivité turbulente.

- Négliger la cinétique et l'évolution chimiques des polluants.

Par la suite, la relation (III.2-3) sera exprimée par :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = -\nabla \cdot (K \cdot \nabla C) + D \Delta C + Q \quad (\text{III.2-5})$$

La résolution de cette équation permet d'obtenir la relation matricielle.

$$C^{obs.} = CTA \times Q \quad (\text{III.2-6})$$

sachant que  $CTA(m,n)$  est la matrice des Coefficients de Transfert Atmosphérique, qui caractérisent la contribution de chaque source sur chaque récepteur,  $C^{obs}(m,1)$  est le vecteur d'observations ou des

mesures, qui décrit les effets à partir desquels nous estimons les causes (débit d'émission),  $n$  et  $m$  sont respectivement le nombre d'inconnues et le nombre d'observations. La matrice de contribution  $CTA$  décrit la relation entre les observations et les paramètres à estimer. Elle joue le même rôle que l'opérateur d'observations et le modèle physique de prévision des méthodes d'assimilation de données.

Dans cette étude, nous utilisons une formulation plus générale du problème qui consiste à reproduire tous les instants d'émissions de différentes sources en utilisant toutes les informations (observations) disponibles car l'objectif est de déterminer l'évolution temporelle des débits non stationnaires (plusieurs inconnus pour chaque source). Mise à part la discrétisation temporelle imposée par la fréquence de mesure, nous choisissons à chaque fois et à l'avance le pas de temps de discrétisation de l'évolution temporelle du débit (Figure III.1). Dans ce cas, les dimensions de notre système matriciel (III.2-6) deviennent assez importantes et sa forme matricielle générale décrite de manière plus développée est :

$$\left( \begin{array}{ccc} \vdots & & \\ \dots & \boxed{CTA_{T_{[Source(i)]}^k \rightarrow R_j(t_i)}} & \dots \\ \vdots & & \end{array} \right) * \begin{pmatrix} Q^1_{[Source(1)]} \\ \vdots \\ Q^k_{[Source(i)]} \\ \vdots \\ Q^{n_T}_{[Source(n)]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{R_1(t_0)} \\ \vdots \\ \boxed{C_{R_j(t_i)}} \\ \vdots \\ C_{R_m(t_{nob})} \end{pmatrix} \quad (III.2-7)$$

où  $CTA_{Q^k_{[Source(i)]} \rightarrow R_j(t_i)}$  présente la contribution du tronçon  $k$  de la source  $i$  sur le récepteur  $R_j$  à l'instant d'observation  $t_i$ ,  $Q^k_{[Source(i)]}$  est le rejet de la source  $i$  pendant le pas de temps  $k$  et  $C_{R_j(t_i)}$  est la concentration mesurée au récepteur  $R_j$  à l'instant  $t_i$ . Les nouvelles dimensions de la matrice sont  $n_L = m \times Nb_{\Delta t_{obs}}$  (nombre de lignes de la matrice  $CTA$ ) et  $n_c = n \times Nb_{\Delta t_{inv}}$  (nombre de colonnes de la matrice  $CTA$ ) (Figure III.1).

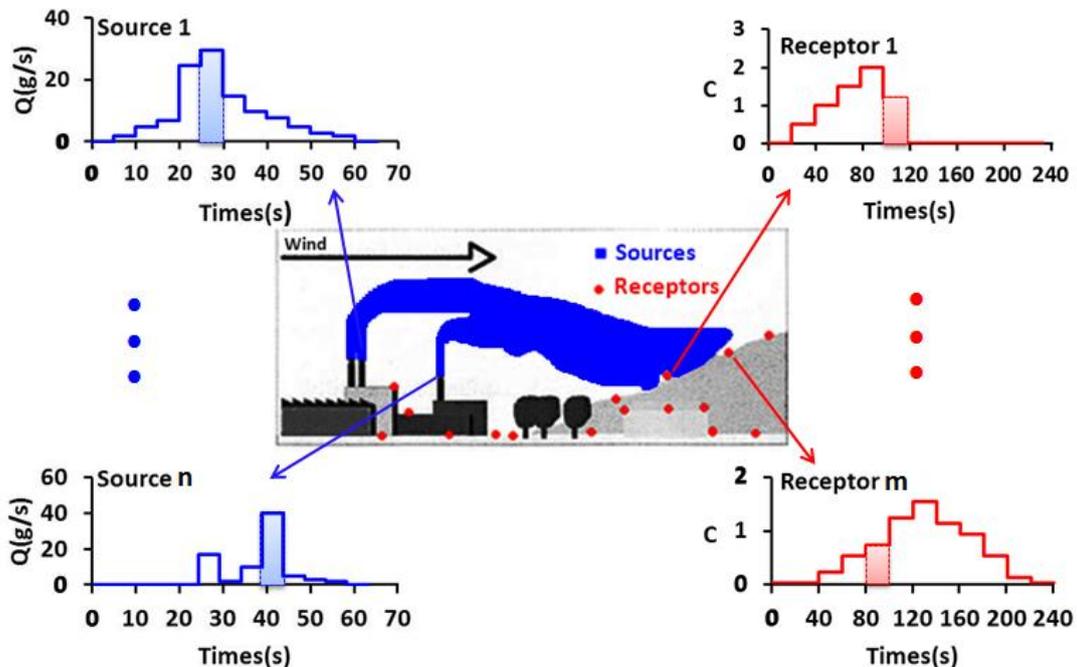


Figure III.1 : Formulation du problème inverse dans le cas général

### III.2.2.2. Calcul de la matrice CTA

La matrice  $CTA$  se construit colonne par colonne au moyen de simulations itératives effectuées avec le modèle direct de dispersion atmosphérique en utilisant des sources élémentaires avec des débits unitaires. Cette formulation peut être effectuée numériquement en se reposant sur une méthode similaire à celle présentée dans les travaux de recherche de Maalej (2010). Il s'agit d'effectuer  $n_c$  simulations en considérant les évolutions des débits comme des fonctions de Heaviside :

$$CTA(j, :) = CTA \times \left[ Q(t - t_{i-1}) - Q(t - t_i) \right]_{i=1..n_c} \quad (III.2-8)$$

Chaque colonne de la matrice décrit la contribution d'un seul tronçon d'émission d'une seule source suivant le pas de temps d'estimation de débit  $\Delta t^{inv}$ , aux différents instants de mesure des différents récepteurs. Chaque ligne de la matrice décrit la contribution des différents pas d'émission des différentes sources à un seul instant de mesure et au niveau d'un seul récepteur. Par exemple, pour le système présenté ci-dessus, la concentration mesurée par le récepteur  $R_j$  à l'instant  $t_j$  s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} C_{R_j(t_j)} = & CTA_{Q_{[Source(1)]}^1 \rightarrow R_j(t_j)} \times Q_{[Source(1)]}^1 + \dots + CTA_{Q_{[Source(1)]}^k \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(1)]}^k + \dots + CTA_{Q_{[Source(1)]}^{Nb_{\Delta t^{inv}}} \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(1)]}^{Nb_{\Delta t^{inv}}} \\ & + \dots + CTA_{Q_{[Source(i)]}^1 \rightarrow R_j(t_j)} \times Q_{[Source(i)]}^1 + \dots + CTA_{Q_{[Source(i)]}^k \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(i)]}^k + \dots + CTA_{Q_{[Source(i)]}^{i \times Nb_{\Delta t^{inv}}} \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(i)]}^{i \times Nb_{\Delta t^{inv}}} \quad (III.2-9) \\ & + \dots + CTA_{Q_{[Source(n)]}^1 \rightarrow R_j(t_j)} \times Q_{[Source(n)]}^1 + \dots + CTA_{Q_{[Source(n)]}^k \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(n)]}^k + \dots + CTA_{Q_{[Source(n)]}^{n_c} \rightarrow R_j(t_j)} Q_{[Source(n)]}^{n_c} \end{aligned}$$

Pour des applications pratiques, en particulier pour contrôler les émissions rejetées par les différentes installations dans une zone industrielle, nous pouvons calculer à l'avance et stocker cette matrice pour les différents scénarios possibles afin de minimiser le temps de calcul de l'inversion.

### III.2.2.3. Algorithme et méthodes de résolution

L'objectif de cet algorithme inverse de dispersion atmosphérique est de calculer le débit d'émission chronique  $Q \in \mathbb{R}^{n_c}$  d'une source de pollution en connaissant les coefficients de la matrice  $CTA \in \mathbb{R}^{(n_r \times n_c)}$  et le vecteur d'observations. Une estimation de  $Q$  peut être une solution acceptable de notre problème inverse si elle réussit à reproduire, avec la matrice  $CTA$ , les mesures des concentrations observées à un epsilon près. Malgré les différents progrès numériques et théoriques dans le domaine de l'optimisation mathématique, la résolution d'un problème linéaire de très grandes dimensions reste non garantie et n'est pas fiable. En effet, les méthodes classiques de résolution d'un problème linéaire ne sont plus valables dès que ce dernier devient mal posé ou mal défini. Dans ce paragraphe, nous présentons un algorithme de recherche spécifique qui peut résoudre un problème linéaire de grande dimension lors de sa formulation, en choisissant une nouvelle combinaison des méthodes d'optimisation qui garantit la rapidité et la fiabilité d'estimation.

#### III.2.2.3.1. Problème bien posé

Le problème inverse présenté ci-dessus est dit bien posé au sens d'Hadamard (1915) s'il admet une solution, unique et stable (continue). Il doit ainsi vérifier les trois conditions suivantes :

- Existence :  $C \in \mathbb{R}^{n_r} \in Im(CTA) \quad \forall C \in \mathbb{R}^{n_r} \exists Q \setminus CTA \times Q = C$
- Unicité :  $Ker(CTA) = \{0\} \quad CTA \times Q = 0 \Rightarrow Q = 0$
- Stabilité

Sous ces conditions d'Hadamard, la matrice  $CTA$  doit être forcément inversible ( $CTA$  inversible si et seulement s'il existe une matrice  $CTA^{-1}$  telle que  $CTA * CTA^{-1} = CTA^{-1} * CTA = Id$ ) et notre problème inverse possède une seule solution unique définie par :

$$Q = (CTA)^{-1} \times C^{obs}. \quad (III.2-10)$$

L'inversion de la matrice  $CTA$  a été effectuée dans cet algorithme par la méthode de factorisation LU (méthode de Crout). Cette méthode de Crout utilisée dans ces travaux pour inverser la matrice  $CTA$  est une méthode d'inversion directe dont le nombre d'opérations est connu à l'avance suivant les dimensions du problème. Elle est fondée sur la décomposition de la matrice  $CTA$  en deux matrices  $L$  et  $U$  qui sont respectivement triangulaire inférieure et triangulaire supérieure :

$$CTA = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{2,1} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n_L,1} & l_{n_L,2} & l_{n_L,3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,n_L-1} & u_{1,n_L} \\ 0 & u_{2,2} & \cdots & u_{2,n_L-1} & u_{2,n_L} \\ 0 & 0 & u_{2,3} & u_{3,n_L-1} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & u_{n_L-1,n_L} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{n_L,n_L} \end{pmatrix} \quad (III.2-11)$$

Cette factorisation est réalisée en utilisant la méthode d'élimination de Gauss qui permet de réécrire la matrice  $CTA$  en effectuant plusieurs combinaisons de ses lignes et en la multipliant par des matrices élémentaires triangulaires inférieures :

$$CTA^{(1)} = M_0 A, \quad CTA^{(2)} = M_1 A^{(1)}, \dots, \quad CTA^{(k)} = M_{k-1} A^{(k-1)}, \dots \quad (III.2-12)$$

Avec :

$$\begin{cases} (M_k)_{k,l} = \frac{-cta_{k,l}^{(k)}}{cta_{k,k}^{(k)}}, & \text{si } l < k \\ (M_k)_{k,l} = 0, & \text{si } l > k \\ (M_k)_{k,k} = 1 \end{cases} \quad (III.2-13)$$

Notre système devient alors :

$$A = M_1^{-1} M_2^{-1} \dots M_{k-1}^{-1} M_k^{-1} U = LU \quad (III.2-14)$$

Cette méthode de résolution n'a pas besoin de mémoire supplémentaire autre que celle utilisée pour stocker la matrice  $CTA$  originale et les deux matrices  $L$  et  $U$ .

Maintenant, en connaissant les deux matrices triangulaires  $L$  et  $U$ , la résolution du système (III.2-6) devient assez simple et rapide. Il suffit de remplacer la matrice  $CTA$  par  $LU$  dans (III.2-6) :

$$L \times U \times Q = C^{obs} \quad (III.2-15)$$

Considérons ensuite le vecteur auxiliaire  $U \times Q = B$ . Nous cherchons la valeur de  $B$  par l'algorithme de « substitution avant » :

début

$$\left| \begin{array}{l} b_1 = C_1^{obs} \\ \text{pour } k = 2..n_L \\ \left| \begin{array}{l} b_k \leftarrow C_k^{obs} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{i,j} b_j \end{array} \right. \\ \text{fin pour} \end{array} \right. \quad (III.2-16)$$

fin

Ensuite, nous utilisons la valeur trouvée de  $B$  pour déterminer la solution unique de notre problème inverse (III.2-6) qui devient :

$$U \times Q = B \quad (III.2-17)$$

Pour cela, nous appliquons l'algorithme de « substitution arrière » :

début

$$\left| \begin{array}{l} q_{n_L} = \frac{b_{n_L}}{u_{n_L, n_L}} \\ \text{pour } k = n_L - 1, \dots, 1 \\ \left| \begin{array}{l} q_k \leftarrow \left( \frac{1}{u_{k,k}} \right) \left( b_k - \sum_{i=k+1}^{n_L} u_{k,i} q_i \right) \end{array} \right. \\ \text{fin pour} \end{array} \right. \quad (III.2-18)$$

fin

### III.2.2.3.2. Problème mal posé

Dans les cas contraires, si le problème inverse est mal posé au sens de Hadamard (ne vérifie pas l'une des conditions citées plus haut), l'inversion de la matrice  $CTA$  ne sera plus possible parce qu'elle est singulière. Dans certaines situations réelles, le nombre d'équations est plus (respectivement moins) important que le nombre d'inconnus et la matrice  $CTA$  est dite dans ce cas verticale (respectivement horizontale). Mathématiquement, si le  $\text{rang}(CTA) = \text{rang}[CTA | C^{obs}]$ , le système possède soit une seule solution approchée au sens des moindres carrés soit une infinité de solutions suivant la nature du problème (surdéterminé ou sous-déterminé).

#### III.2.2.3.2.1. Problème surdéterminé

Le système (III.2-6) est dit surdéterminé s'il admet plus d'équations que d'inconnus, c'est-à-dire si la matrice  $CTA$  est de rang plein (égale à  $n_c$  avec  $n_L > n_c$ ). Cette situation correspond généralement dans la pratique au cas où le nombre d'observations (mesures disponibles) est supérieur au nombre d'inconnus à chercher (débits d'émission). Dans ce cas, nous recherchons la solution au sens des moindres carrés (Eq. (III.2-19)) qui minimise la norme euclidienne entre  $C^{obs}$  et  $CTA * Q$  car le problème n'admet pas de solutions exactes ( $C^{obs} \notin \text{Im}(CTA)$ ).

$$J_1 = \|C^{obs} - CTA \times Q\|_{\mathbb{R}^{n_c}}^2 = \sum_{i=1}^{n_c} \left[ C_i^{obs} - \sum_{j=1}^{n_L} cta_{ij} q_j \right] \left[ C_i^{obs} - \sum_{k=1}^{n_L} cta_{ik} q_k \right] \quad (III.2-19)$$

Pour déterminer cette solution au sens des moindres carrés, nous écrivons tout d'abord  $J_1$  sous la forme d'une fonction quadratique en  $Q$  :

$$\begin{aligned} J_2(Q) &= \|C^{obs} - CTA \times Q\|_{\mathbb{R}^{n_c}}^2 = \frac{1}{2} (C^{obs} - CTA \times Q)^t (C^{obs} - CTA \times Q) \\ &= \frac{1}{2} \left[ C^{obs^t} C^{obs} - Q^t \times CTA^t \times C^{obs} - C^{obs^t} \times CTA \times Q + Q^t \times CTA^t \times CTA \times Q \right] \end{aligned} \quad (III.2-20)$$

Ensuite, nous avons utilisé une méthode d'optimisation usuelle parce que les problèmes de moindres carrés sont des systèmes convexes lorsque le modèle est linéaire et leurs minimums locaux sont des minimums globaux:

$$\begin{aligned} \nabla J_1(Q) &= CTA^t \times CTA \times Q - CTA^t \times C^{obs} = 0_{\mathbb{R}^{n_L}} \\ \frac{\partial J_1}{\partial q_q} &= 2 \left[ \sum_{k=1}^{n_c} \left( q_k \sum_{i=1}^{n_L} cta_{iq} cta_{ik} \right) - \sum_{i=1}^{n_L} cta_{iq} C_i^{obs} \right] = 0 \end{aligned} \quad (III.2-21)$$

$J_1$  est une fonction quadratique et la relation (III.2-21) admet donc un seul zéro qui correspond bien au minimum cherché de cette fonctionnelle et qui s'écrit de la manière suivante :

$$Q = (CTA^t \times CTA)^{-1} \times CTA^t \times C^{obs} \quad (III.2-22)$$

où  $(CTA^t \times CTA)^{-1}$  est le pseudo inverse de  $CTA$  et  $(CTA^t \times CTA)$  est une matrice injective, définie positive sous l'hypothèse que  $CTA$  est de rang plein.

Pour des applications similaires à une méthode variationnelle d'assimilation de données, si les erreurs d'observations (de mesures) sont supposées connues d'avance, nous pouvons ajouter la matrice de covariance d'erreur d'observations dans la fonction coût  $J_1$  (III.2-19) afin d'avoir une nouvelle fonctionnelle  $J_2$  (équation(III.2-23)) qui tient compte des erreurs de mesures pendant l'estimation de débit.

$$J_2(Q) = \frac{1}{2} (C^{obs} - CTA \times Q)^t R^{-1} (C^{obs} - CTA \times Q) \quad (III.2-23)$$

où  $R$  est la matrice de pondération qui est diagonale et définie positive.

$$R = \begin{pmatrix} \sigma_{1,1}^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{2,2}^2 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_{n_L, n_L}^2 \end{pmatrix} \quad (III.2-24)$$

La solution (III.2-26) définissant le minimum de cette nouvelle fonction coût est calculée de la même manière que dans le cas précédent, en cherchant le zéro de la dérivée de la fonction coût  $J_2$  (III.2-23) :

$$\nabla J_2(Q) = CTA^t \times R^{-1} \times CTA \times Q - CTA^t \times R^{-1} \times C^{obs} = 0 \quad (III.2-25)$$

$$Q = (CTA^t \times R^{-1} \times CTA)^{-1} CTA^t \times R^{-1} \times C^{obs} \quad (III.2-26)$$

La mise en œuvre numérique de cette méthode repose sur le même principe de factorisation  $LU$ . En effet, nous appliquons cette dernière pour chercher la matrice inverse de  $(CTA^t \times R^{-1} \times CTA)$  en utilisant la multiplication séquentielle par des matrices élémentaires pour la mettre sous la forme triangulaire. Le calcul de l'inverse de la matrice de covariance des erreurs d'observation  $R^{-1}$  est direct car elle est diagonale.

### III.2.2.3.2.2. Problème sous-déterminé

Avec un nombre d'équations inférieur au nombre d'inconnues à estimer, le problème inverse est dit sous-déterminé et admet une infinité de solutions avec des erreurs d'estimation nulles. Ce cas est vérifié seulement lorsque la matrice  $CTA$  est de rang plein (égale au nombre des colonnes  $n_L$ ). Nous sommes donc obligés d'intégrer une nouvelle contrainte dans notre problème (III.2-27) pour choisir la solution qui nous convient le mieux ou qui reflète le plus la réalité physique de l'application. Cette contrainte ne dépend que de la réalité de terrain et des conditions d'application. Dans cette présentation nous choisissons une hypothèse assez forte pour sélectionner la meilleure solution. Nous supposons que la solution optimale du problème correspond à la solution pour laquelle la norme de L2 de  $Q$  est minimale. Notre problème inverse se transforme alors en un problème d'optimisation avec contrainte d'égalité qui prend la forme :

$$\begin{cases} \min_{Q \in \mathbb{R}^{n_L}} \frac{1}{2} (Q^T \times Q) \\ CTA \times Q - C^{obs} = 0_{\mathbb{R}^{n_L}} \end{cases} \quad (III.2-27)$$

Nous utilisons dans cette étude la méthode des multiplicateurs de Lagrange qui a été largement appliqué pour résoudre des problèmes inverses sous contraintes d'égalité (Aster et al., 2005). Dans le cas des problèmes purement sous-déterminés comme le nôtre, la méthode des multiplicateurs de Lagrange permet de déterminer la solution optimale du problème en minimisant la fonction coût composée :

$$J_L = \frac{1}{2} Q^T \times Q + \lambda^T \times (C^{obs} - CTA \times Q) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n_c} q_k^2 - \sum_{i=1}^{n_L} \lambda_i \left( C_i^{obs} - \sum_{j=1}^{n_c} cta_{ij} q_j \right) \quad (III.2-28)$$

où  $\lambda$  est le vecteur des paramètres de Lagrange (multiplicateurs de Lagrange). La solution de cette équation vérifie respectivement ces deux conditions :

$$\begin{aligned} \nabla_Q J_L &= Q - CTA^t \times \lambda = 0_{\mathbb{R}^{n_c}} \\ \nabla_\lambda J_L &= C^{obs} - CTA \times Q = 0_{\mathbb{R}^{n_L}} \end{aligned} \quad (III.2-29)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} Q &= CTA^t \lambda \\ C^{obs} &= CTA \times Q \end{aligned} \quad (III.2-30)$$

et qui implique :

$$CTA \times Q = CTA \times CTA^t \times \lambda \quad (III.2-31)$$

Or  $CTA \times CTA^t = C^{obs}$  et  $(CTA \times CTA^t)$  est une matrice inversible (car le rang( $CTA$ ) est plein) donc :

$$Q_L = CTA^t \times (CTA \times CTA^t)^{-1} \times C^{obs} \quad (III.2-32)$$

Par ailleurs, nous pouvons ajuster la formulation de ce problème pour qu'il soit capable d'intégrer d'autres contraintes d'inégalités. La sélection des solutions de  $Q$  peut donc être filtrée par des informations réelles qui dépendent des réalités physiques telles que la positivité du débit :

$$\begin{cases} \min_{Q \in \mathbb{R}^{n_c}} \frac{1}{2} (Q^T \times Q) \\ CTA \times Q - C^{obs} = 0_{\mathbb{R}^{n_L}} \\ Q \geq 0_{\mathbb{R}^{n_{sc}}} \end{cases} \quad (III.2-33)$$

Ce problème, dans lequel nous ajoutons  $n_{sc}$  contraintes, peut être résolu par la méthode l'optimisation de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) (Kuhn and Tucker, 1951):

$$\begin{aligned} Q &= Q_L + \left[ CTA^t \times (CTA \times CTA^t)^{-1} \times CTA \times C_q - C_q \right] \\ &\left[ I - (CTA \times C_q)^t \times (CTA \times CTA^t)^{-1} \times CTA \times C_q \right]^{-1} \left[ \left( (CTA \times C_q)^t \times Q_L - S \right) \right] \end{aligned} \quad (III.2-34)$$

Avec  $Q_L$  la solution du problème (III.2-27) sans utiliser les contraintes d'inégalités,  $C_q$  la matrice carrée de  $\mathbb{R}^{n_c \times n_c}$  admettant  $n_{sc}$  valeurs unitaires dans sa diagonale et  $S$  le vecteur formé par les différentes valeurs limites imposées, qui correspondent aux valeurs nulles dans ce cas.

### III.2.2.3.3. Problème mal défini

Les méthodes utilisées ci-dessus pour résoudre le problème inverse sont des techniques simples et rapides parce que les combinaisons linéaires entre les paramètres à estimer (débit d'émission) et les observations (mesures de concentration) décrivent un système d'équations dit bien défini. Néanmoins, lorsque la matrice  $CTA$  n'est pas inversible et que  $\text{rang}(CTA) \neq \text{rang}(CTA | C^{obs})$ , les méthodes citées ci-dessus ne seront plus applicables. Dans ces cas, nous utilisons la méthode de

décomposition en valeurs singulières (SVD) pour résoudre une partie des problèmes en négligeant les effets de certaines contraintes sur le terme source. Cette analyse, nous permet donc de récupérer le maximum possible d'informations sur le terme source (débit de rejet). Cette méthode de décomposition en valeurs singulières est établie depuis les années 1870 pour traiter des problèmes dont la matrice est bien carrée (comme cité par Klema et Laub (1980)). Elle représente maintenant l'une des méthodes les plus utilisées dans différents domaines d'applications réelles où les problèmes sont représentés par un système d'équations linéaires quelconques. Comme d'autres méthodes d'estimation, la mise en œuvre numérique et l'optimisation de cette approche SVD devient un sujet de recherche par excellence depuis l'apparition des ordinateurs. Par exemple, Golub et Kahan (1965) ont fourni une description numérique détaillée de cet algorithme de résolution. Klema et Laub (1980) ont présenté plus tard une démarche détaillée d'implémentation numérique de cette approche en donnant quelques exemples de simulations réalisées par ordinateur. De même, Chan (1982) a proposé des modifications pertinentes de cette méthode pour optimiser le temps de calcul numérique. Ainsi, il présente dans son article l'évolution de son développement numérique au cours du temps. La méthode de décomposition en valeurs singulières repose sur la factorisation de la matrice  $CTA$  en deux matrices orthogonales ( $U$ ,  $V$ ) et une matrice souvent rectangulaire  $\Sigma$  comme suit :

$$CTA = U \times \Sigma \times V^t \quad (\text{III.2-35})$$

avec :

- $U = (u_1, u_2, \dots, u_{n_l})$  matrice orthogonale ( $UU^t = U^tU = I_{n_l}$ ) des vecteurs singuliers à gauche de  $CTA$ .
- $V = (v_1, v_2, \dots, v_{n_c})$  matrice orthogonale ( $V \times V^t = V^t \times V = I_{n_c}$ ) des vecteurs singuliers à droite de  $CTA$ .
- $\Sigma$  est une matrice diagonale de  $\mathbb{R}^{(n_l, n_c)}$  qui s'écrit de la manière suivante :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{cta} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.2-36})$$

Où  $\Sigma_{cta} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r)_{r=\text{rang}(CTA)}$  la matrice associée aux valeurs singulières  $\sigma_i > 0$  de  $CTA$ .

La troncation de la décomposition en valeurs singulières est une méthode de conditionnement qui permet d'établir un résultat d'estimation approximatif en utilisant une autre matrice de rang plus faible :

$$U \times \Sigma \times V^t \times Q = C^{obs} \quad (\text{III.2-37})$$

Puisque les matrices  $U$  et  $V$  sont orthogonales, la solution (III.2-38) est donnée directement en la multipliant respectivement par les matrices de la décomposition en valeurs singulières de  $CTA$  ( $U^t, \Sigma^{-1}$  et  $V$ ) :

$$Q = V \begin{pmatrix} \Sigma_{cta}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \times U^t \times C^{obs} \quad (\text{III.2-38})$$

La démarche de l'algorithme SVD, dans cette étude, consiste donc à éliminer les coefficients de contribution les plus faibles dans la matrice  $CTA$  en remplaçant la matrice  $\Sigma$  par une autre tronquée pour avoir un problème d'inversion. Cela ne permet de résoudre réellement qu'une partie du problème inverse formulé dans la section III.2.2.1. Bien que la résolution numérique en utilisant la méthode de décomposition en valeurs singulières soit plus stable et plus précise, elle est assez coûteuse en temps de calcul et en mémoire. Pour cela, nous ne l'utilisons que dans des cas exceptionnels, lorsque la résolution avec les autres méthodes ne sera plus possible. La mise en

œuvre numérique de cette approche repose en première étape sur des multiplications successives des deux côtés de la matrice  $CTA$  avec des matrices de type Householder pour la mettre sous une forme bi-diagonale :

$$B = P \times (CTA_{bi-diag.}) \times M \quad (III.2-39)$$

où  $P$  et  $M$  sont deux matrices orthogonales et  $CTA_{bi-diag.}$  est une matrice bi-diagonale de la forme :

$$CTA_{bi-diag.} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & b_{k-1} \\ 0 & & & a_k \\ & & 0 & \end{pmatrix} \quad (III.2-40)$$

sachant que les coefficients diagonaux  $a_k$  et  $b_k$  s'écrivent de la manière suivante à chaque transformation  $k$  :

$$a_k = \frac{cta_{k,k}^{(k)}}{|cta_{k,k}^{(k)}|} \left( \sum_{i=k}^{n_i} |cta_{i,k}^{(k)}|^2 \right)^{1/2} \quad (III.2-41)$$

$$b_k = -\frac{cta_{k,k+1}^{(k+1/2)}}{|cta_{k,k+1}^{(k+1/2)}|} \left( \sum_{j=k+1}^{n_c} |cta_{k,j}^{(k+1/2)}|^2 \right)^{1/2} \quad (III.2-42)$$

Ensuite, nous utilisons un calcul itératif basé sur la méthode de factorisation  $QR$  (où  $Q$  est une matrice orthogonale et  $R$  est triangulaire supérieure) pour retrouver les valeurs singulières de  $B$ . L'implémentation numérique de cette méthode pour résoudre le problème inverse est basée sur l'algorithme de décomposition  $QR$ .

#### III.2.2.3.4. Régularisation par pénalisation

Les méthodes de régularisation sont des techniques largement utilisées pour compenser les erreurs d'instabilité dues au manque de données ou à la forte sensibilité de l'algorithme à un paramètre d'entrée. Dans ces cas, il est souvent nécessaire d'ajouter des connaissances a priori dans la fonction coût classique. Nous avons utilisé dans cette étude la méthode de pénalisation de Tikhonov (Tikhonov et Arsenin, 1977) pour traiter le problème de reconstruction des débits d'émission de courte durée à partir des signaux bruts instantanés enregistrés dans la soufflerie (Section (IV.1.4)). Cette approche qui est à peu près équivalente à une SVD tronquée, permet d'atténuer l'effet d'amplification du bruit dans les signaux de concentration mesurés. La mise en œuvre numérique de cette méthode repose sur la minimisation d'une nouvelle fonction coût pénalisée :

$$J_{RT} = \|C^{obs} - CTA \times Q\|_{\substack{c \\ n_c}}^2 + \varepsilon^2 \Gamma(Q) \quad (III.2-43)$$

avec  $\varepsilon$  le paramètre de régularisation et  $\Gamma(Q)$  le terme de pénalisation qui a été souvent présenté sous une forme quadratique de type :

$$\Gamma(Q) = \|D \times (Q - Q_{priori})\|^2 \quad (III.2-44)$$

où le choix de l'opérateur de régularisation  $D$  est largement étudié dans plusieurs études de recherche (Bruneau et al., 1991; Cullum, 1979; Neumaier, 1998). Cet opérateur est choisi égal à la matrice identité dans cette étude.

On constate que la solution de  $J_{RT}$  varie entre la solution au sens des moindres carrés lorsque  $\varepsilon$  tend vers zéro et la solution a priori lorsque  $\varepsilon$  devient très grand. Etant donné que les informations a priori sont souvent indisponibles dans les cas réels (rejets accidentels, fuites, ...), nous avons adopté une nouvelle fonction coût en supprimant l'ébauche (l'information a priori) sur le débit :

$$J_{RT} = \left\| C^{obs} - CTA \times Q \right\|_{\mathbb{R}^{nc}}^2 + \varepsilon^2 \left\| Q \right\|_{\mathbb{R}^{nc}}^2 \quad (III.2-45)$$

La minimisation de cette fonctionnelle a été effectuée par la méthode utilisée dans la section précédente:

$$\nabla J_{RT} = -2 \left[ CTA^t \times C^{obs} - (CTA^t \times CTA + 2\varepsilon^2 I) \times Q \right] = 0 \quad (III.2-46)$$

ce qui implique que la solution optimale de ce problème est égale à :

$$Q_{RT} = (CTA^t \times CTA + \varepsilon^2 I)^{-1} \times CTA^t \times C^{obs} \quad (III.2-47)$$

Avant de lancer le calcul numérique, il faut déterminer le paramètre de régularisation  $\varepsilon$ . Cette estimation de  $\varepsilon$  doit être effectuée d'une manière qui assure l'équilibrage entre les deux termes de la fonction coût et plus précisément sans détériorer les effets de l'un par rapport à l'autre. Pour cela, plusieurs travaux de recherche (Hansen, 2000a; Kathirgamanathan et al., 2003) ont étudié la fiabilité des méthodes d'estimation de ce paramètre de régularisation et leur sensibilité aux types de problème à résoudre. Par exemple, Kathirgamanathan et al. (2003) ont comparé trois méthodes différentes d'estimation de  $\varepsilon$  et ont montré que les deux approches de Cheaper et de L-curve fournissaient des résultats assez satisfaisants. Bien que la méthode d'estimation de Cheaper ait été identifiée dans la même étude comme étant la plus rapide, nous avons implémenté la méthode de L-curve parce qu'elle est la plus utilisée pour reproduire des émissions de pollution bruitées (Kathirgamanathan et al., 2003; Zhang et al., 2013). La technique de L-curve est plus documentée et bien détaillée dans plusieurs travaux de recherche (Calvetti et al., 2000; Engl et Grever, 1994; Hanke, 1996; Hansen et O'Leary, 1993; Hansen, 2000a, 1992; Zhu et al., 2011a). Cette méthode repose tout d'abord sur la représentation de l'évolution logarithmique du deuxième terme de la fonction coût  $\left\| Q \right\|_{\mathbb{R}^{nc}}^2$  en fonction du premier  $\left\| C^{obs} - CTA \times Q \right\|_{\mathbb{R}^{nc}}^2$  pour une séquence des paramètres de régularisation  $\varepsilon > 0$  (Figure III.15-a). Ensuite, nous choisissons la valeur optimale de  $\varepsilon$  graphiquement à partir de cette courbe. Il s'agit d'après Hansen (1992) de la valeur  $\varepsilon$  qui correspond au point dans le creux de ce graphe. Cette approche a été mise en œuvre numériquement par une méthode itérative en lançant l'algorithme de résolution de manière séquentielle pour chaque valeur a priori de  $\varepsilon > 0$ . Nous présentons en détail cette démarche dans la section (IV.1.3). Nous avons comparé la fiabilité de cette technique par rapport aux autres approches utilisées pour estimer les paramètres de régularisation comme les méthodes U-curve, f-slope ou la résolution analytique de la courbure maximale. L'objectif est d'identifier la meilleure approche qui permet de réduire les effets de bruit dans les signaux réels de concentration et les erreurs d'inversion à partir des signaux bruts non moyennés de concentration (Ben Salem et al., 2013).

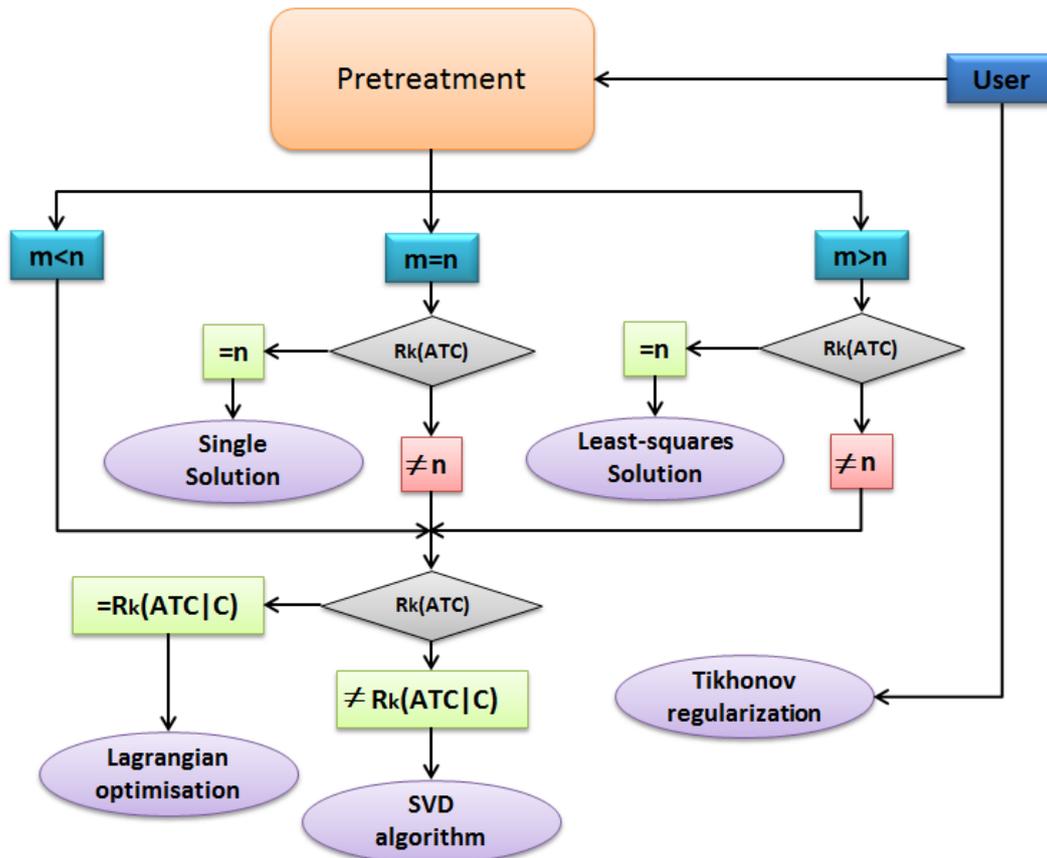


Figure III.2 : Logigramme général de l'algorithme de résolution

La Figure III.2 illustre le logigramme général du fonctionnement de l'algorithme inverse présenté ci-dessus. Comme le montre la figure, c'est l'utilisateur qui fait le choix d'appliquer la méthode de régularisation ou non. En effet, cela dépend de la nature du problème à traiter et des données d'entrée disponibles et qui peuvent être bruitées ou instantanées. Dans le cas contraire, l'algorithme sélectionne la méthode d'optimisation la plus adaptée après avoir analysé et traité les données en amont. Le choix de la méthode de résolution est souvent effectué suivant les nouvelles dimensions du système à résoudre, comme illustré ci-dessus.

### III.2.3. Etude de sensibilité de l'algorithme inverse

Avant de passer à la validation de cet algorithme sur des cas académiques en utilisant des mesures en soufflerie, nous avons effectué des simulations spécifiques pour comprendre et identifier ses principales limites d'application. Les tests de sensibilité réalisés ont permis d'étudier le comportement de cet algorithme hybride par rapport à la variation de quelques paramètres d'entrée du modèle direct et inverse tels que les paramètres météorologiques, les positions des récepteurs, le pas de temps de lissage des observations. Afin d'éviter d'avoir des erreurs d'inversion de débit liées aux observations et aux modèles directs de dispersion atmosphérique, nous n'avons utilisé dans cette partie uniquement des mesures synthétiques construites par des simulations directes du modèle SIRANERISK. Le modèle de dispersion et les mesures de concentration sont donc considérés comme parfaits dans ce cas. De façon similaire, Allen et al. (2007) ont étudié la sensibilité de leur méthode inverse (basée sur l'algorithme génétique) aux bruitages des observations et aux directions du vent en utilisant des mesures produites par un modèle de dispersion atmosphérique de type panache gaussien.

### III.2.3.1. Scénario de base

Dans cette étude de sensibilité, nous avons fixé certains paramètres d'entrée nécessaires pour la mise en œuvre de modèle direct SIRANERISK. La condition météorologique est considérée stationnaire : direction et vitesse du vent constantes. L'écoulement est constitué d'une couche limite atmosphérique neutre dont le profil de vitesse est logarithmique. La source est placée au niveau du sol et son débit d'émission est périodique (Figure III.3). Le signal d'émission choisi pour ce scénario est variable par palier de 10s pendant 120s et le pas de temps de recherche du débit (d'inversion)  $\tau_q$  est égal à 5s. Ce choix de profil de débit est effectué pour tester la fiabilité de l'algorithme inverse à déterminer des débits instantanés, avec des ratios élevés entre les valeurs maximales et minimales (l'émission instationnaire varie ici entre 0.3 et 2.8  $\mu\text{g}\cdot\text{s}^{-1}$ ). Les observations ont été récupérées toutes les 5 secondes sur une fenêtre temporelle d'observation de 30 min. D'après le principe de formulation du problème inverse présenté dans (III.2.2), la matrice CTA dans ce cas d'étude est constituée de 360 lignes (équations) et de 24 colonnes (inconnues).

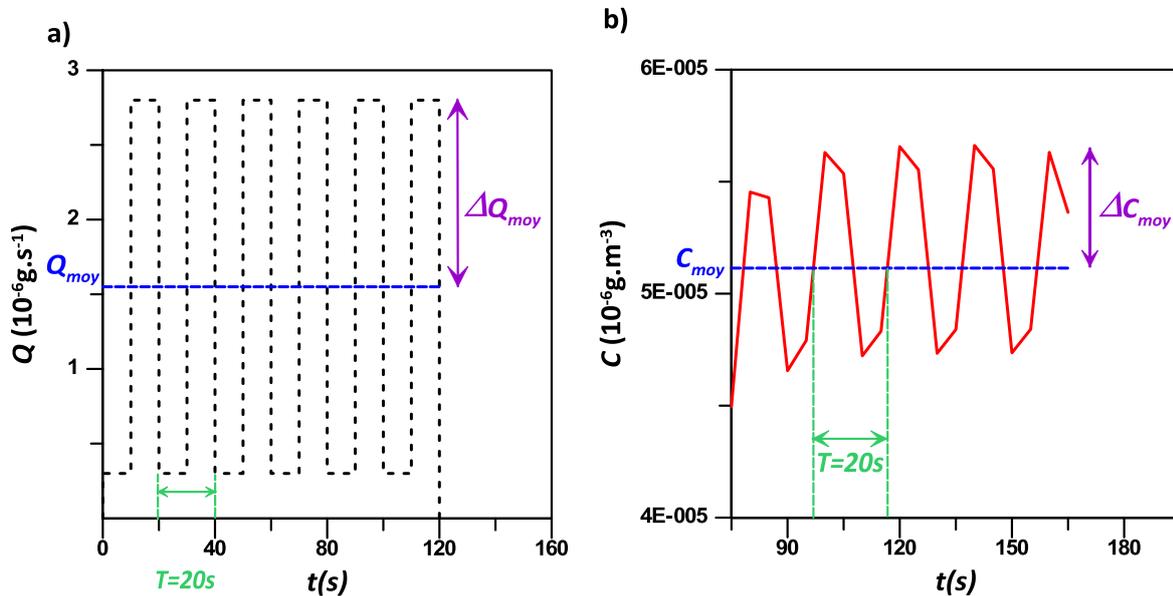


Figure III.3 : Données d'entrée et de sortie du scénario de base. Caractéristiques du débit d'émission rejeté (a) et de la concentration observée (b)

### III.2.3.2. Sensibilité par rapport à la position des récepteurs

Pour comprendre l'impact de la variation de la position des récepteurs sur les résultats de l'algorithme inverse, nous avons effectué une dizaine de simulations d'estimation d'un débit de rejet chronique d'une source fixe en utilisant à chaque fois des observations synthétiques mesurées dans une position différente en s'éloignant de la source (Figure III.4).

Dans cette partie nous étudions la variabilité de certains critères cités ci-dessous en fonction d'une grandeur adimensionnée spécifique liée à la physique de la dispersion :

$$\alpha = \frac{\Delta X_{S-R}}{U_{adv.} \times T} \quad (\text{III.2-48})$$

où  $U_{adv.}$  est la vitesse d'advection du panache,  $T$  est la période du signal d'émission et  $\Delta X_{S-R}$  la distance entre le récepteur utilisé dans l'inversion et la source de pollution.

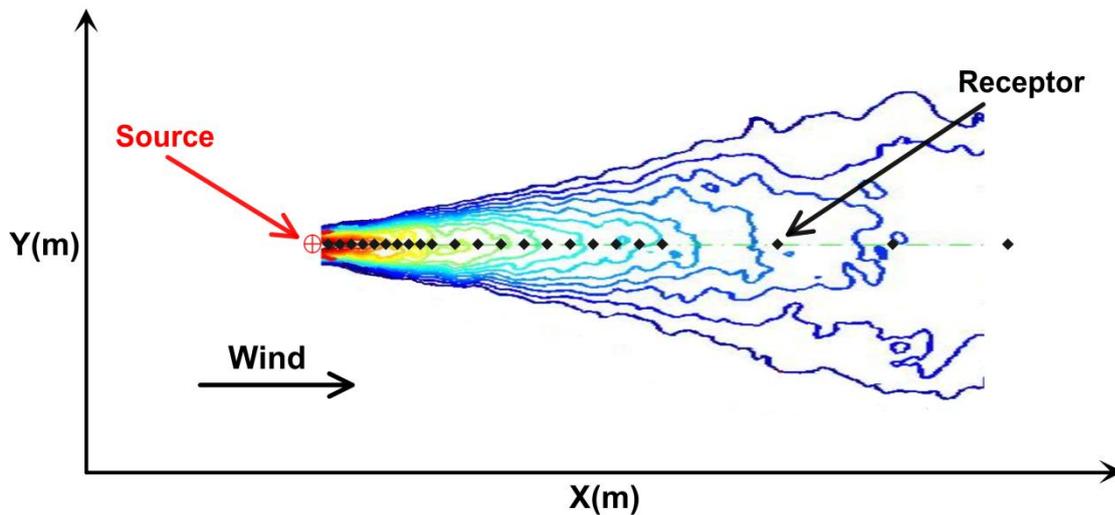


Figure III.4 : Configurations choisies pour l'étude de sensibilité des positions des récepteurs

L'emploi de cette grandeur permet de déterminer la distance d'observation maximale du récepteur par rapport à la source, à partir de laquelle l'algorithme inverse n'arrive plus à reproduire les émissions avec une fréquence donnée ( $1/T$ ). En effet, la qualité des signaux de concentration utilisés dans l'inversion est assez importante pour reproduire la fréquence d'émissions instationnaires. Comme le montre la Figure III.5, les signaux d'observation deviennent de plus en plus lisses en s'éloignant de la source, sous l'effet de la diffusion turbulente. En conséquence, l'identification des débits variant à haute fréquence devient plus difficile en utilisant ces concentrations mesurées loin de la source.

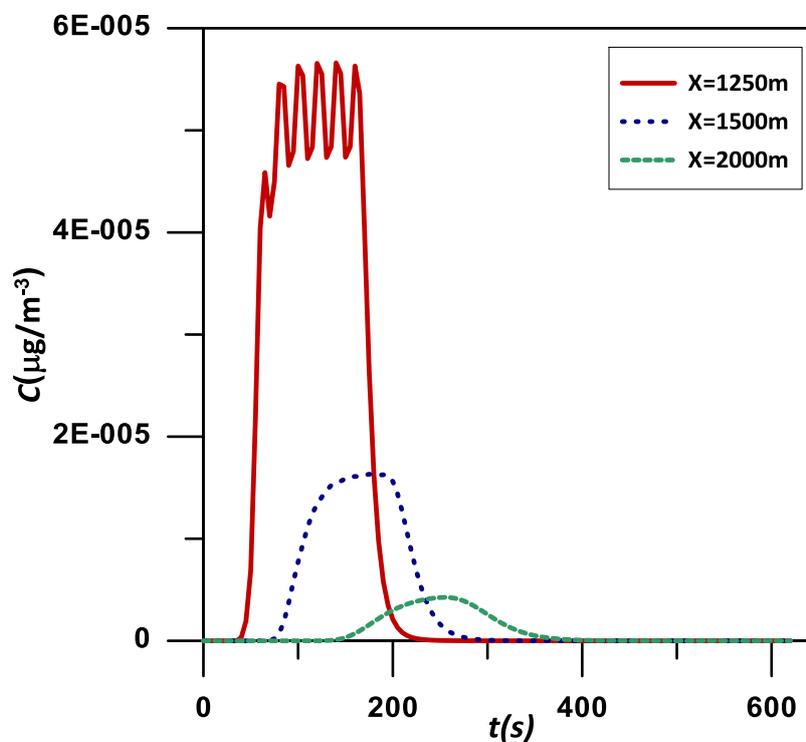


Figure III.5 : Evolution des profils de concentration dans trois récepteurs placés à trois distances différentes de la source.

La comparaison entre les estimations par l'algorithme inverse et le débit réel a été effectuée en utilisant divers paramètres statistiques pour avoir une bonne évaluation de la fiabilité de ce modèle vis-à-vis de la position des récepteurs. Nous avons utilisé trois paramètres statistiques de validation présentés par Chang et Hanna (2004) et trois autres paramètres liés à la notion d'erreur relative. Les paramètres statistiques d'évaluation choisis pour étudier la sensibilité de l'algorithme inverse sont respectivement :

- Le coefficient de corrélation  $R$
- Le biais fractionnel  $FB$
- L'erreur quadratique moyenne normalisée  $NMSE$
- L'erreur relative maximale  $MER$
- L'erreur relative moyenne  $AER$
- L'erreur relative de la quantité de masse totale rejetée dans l'atmosphère  $ERQM$

La Figure III.6 illustre l'évolution de ces paramètres en fonction de la grandeur adimensionnée  $\alpha$  (présentée ci-dessus). Nous observons que cet algorithme reproduit de manière satisfaisante les émissions de la source tant que  $\alpha$  reste inférieur à 25. L'évolution des différents paramètres statistiques utilisés ( $R$ ,  $FB$  et  $NMSE$ ) indique de bonnes estimations du débit puisque les valeurs de  $NMSE$  et de  $FB$  sont assez proches de leurs valeurs idéales (zéro) et les coefficients de corrélation sont presque égaux à 1. Les résultats des comparaisons entre les débits réels et les débits inversés pour différentes positions des récepteurs sont illustrés sur la Figure III.7. On constate que la qualité de l'inversion est assez satisfaisante bien que l'écart maximal local entre le débit estimé et le débit réel augmente en s'éloignant de la position de la source. La qualité de l'inversion est quasiment parfaite pour des distances inférieures à 300 m de la source (Figure III.7-a et Figure III.7-b).

L'étude des limites d'application de cet algorithme a été effectuée en analysant à la fois l'évolution des erreurs relatives sur les émissions totales et l'évolution des erreurs relatives maximales. La Figure III.6-d illustre que les erreurs relatives maximales ne dépassent pas 20% pour toutes les valeurs de  $\alpha$  inférieures à 10. Cependant, au-delà de ce seuil, on peut avoir des erreurs relatives d'estimation assez grandes. Pour  $\alpha > 10$ , nous observons que l'évolution des erreurs d'estimation est fluctuante et la sensibilité du système de modélisation inverse n'est plus homogène. Ce résultat peut être exploité pour bien étudier la performance de l'algorithme inverse et définir ses limites d'applications dans des configurations réelles. Par exemple, pour une vitesse d'advection supposée égale à  $10\text{ms}^{-1}$ , ce système de modélisation inverse sera capable de reconstruire un rejet de fréquence  $1/T=0.05\text{ s}^{-1}$  avec des erreurs relatives maximales inférieures à 20% si le récepteur est placé à une distance  $\Delta X_{S,R} < 1000\text{m}$  de la source. Bien que les erreurs relatives maximales d'inversion soient relativement élevées, la Figure III.6-e montre que la qualité de résultats peut être considérée comme acceptable tant que les erreurs relatives moyennes de l'estimation de débit ne dépassent pas 10%. D'autre part, l'algorithme montre une grande fiabilité de l'inversion de la quantité de masse totale rejetée dans l'atmosphère. En effet, l'erreur relative maximale de l'estimation des émissions totales ne dépasse pas  $10^{-3}\%$  pour toutes les valeurs de  $\alpha$ . Cela montre la faible sensibilité de cet algorithme face à la distance sources-récepteurs si l'objectif est de déterminer seulement la quantité totale de polluants émise pendant un évènement accidentel.

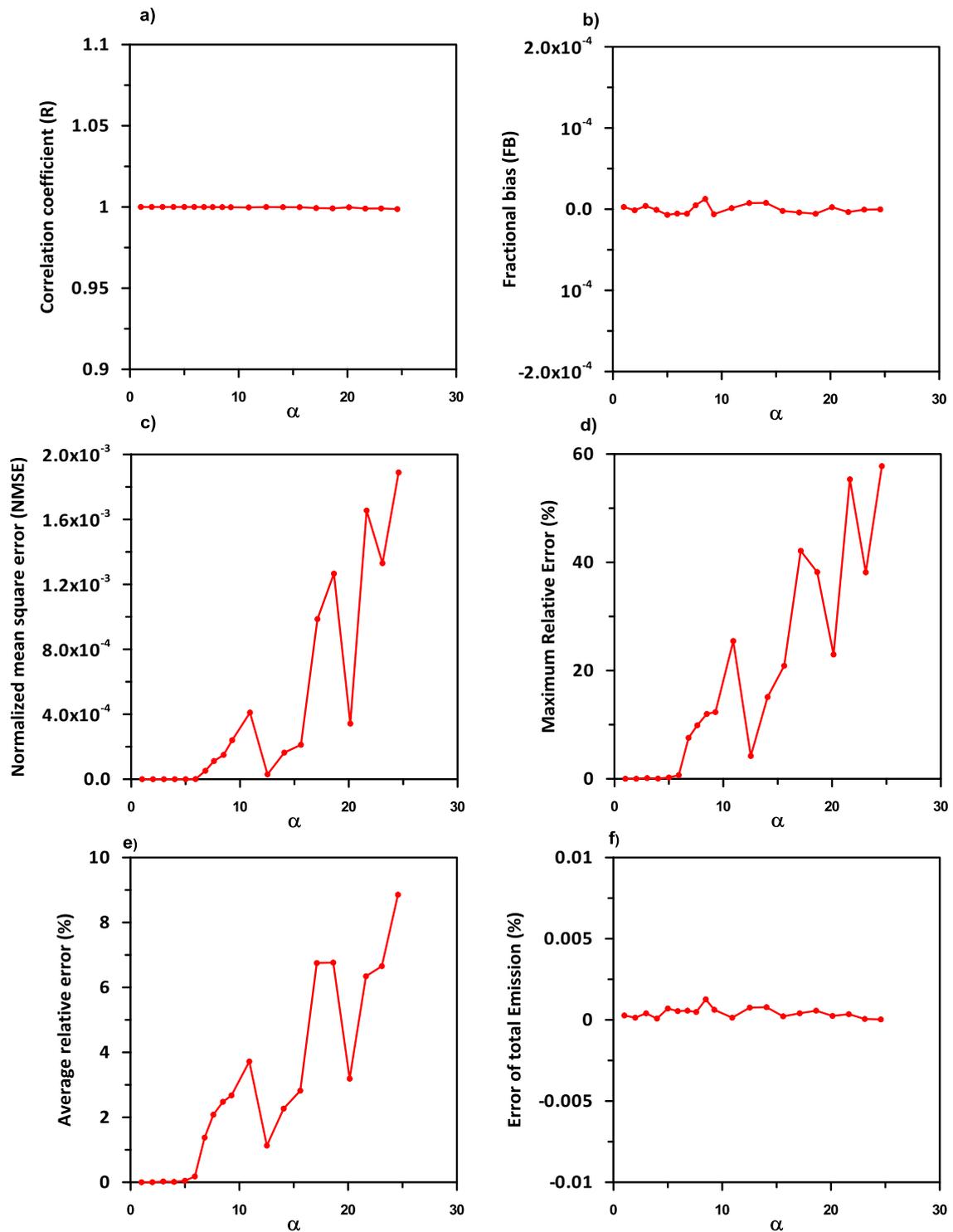


Figure III.6: Evolution des paramètres statistiques choisis en fonction de la distance adimensionnée  $\alpha$ . (a) Coefficient de corrélation. (b) Biais Fractionnel. (c) Erreur quadratique moyenne normalisée (d) Erreur relative maximale (e) Erreur relative moyenne (f) Erreur relative sur la quantité de masse rejetée.

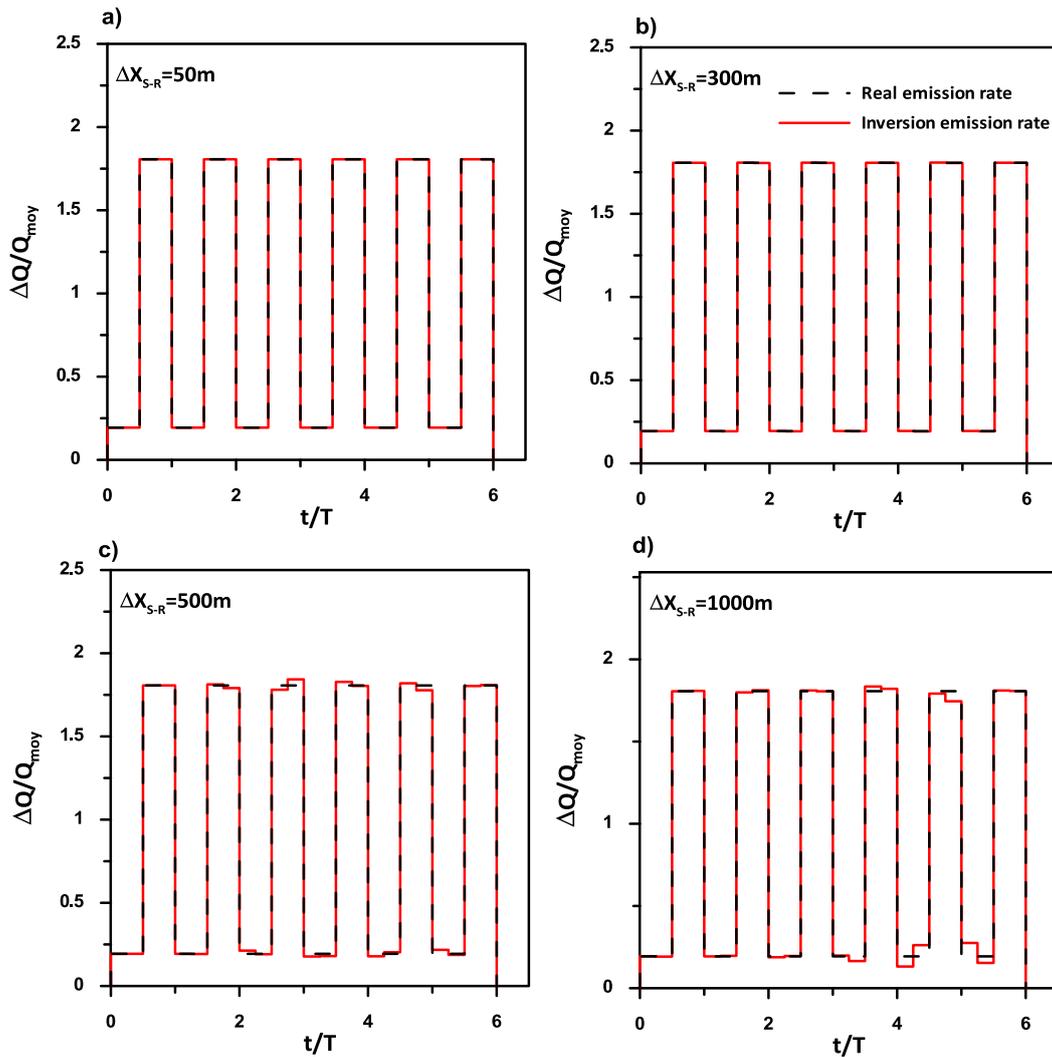


Figure III.7 : Comparaison entre les débits réels et simulés en utilisant des mesures de concentration effectuées respectivement à une distance de (a) 50m, (b) 300m, (c) 500m et (d) 1000m de la source de pollution.

### III.2.3.3. Sensibilité par rapport au pas de temps d'observation

L'analyse de l'influence du pas de temps d'échantillonnage des observations peut nous apporter des informations intéressantes sur la fiabilité du modèle dans les applications réelles puisque les fréquences de mesure des concentrations peuvent varier sensiblement d'un instrument de mesure à l'autre. Afin de bien étudier la fiabilité de l'inversion par rapport au pas de temps d'échantillonnage, nous avons effectué plusieurs tests de sensibilité avec 5 signaux de concentration mesurés à différentes distances de la source (50m ; 100m ; 200m ; 500m et 1000m). Les Figures III.8-a et III.8-b illustrent respectivement les courbes d'évolution des erreurs relatives maximales et des erreurs relatives sur l'émission totale en fonction d'une grandeur adimensionnée :

$$\tau = \frac{\tau_c}{\tau_q} \quad (\text{III.2-49})$$

où  $\tau_c = T_c/T$  est le pas de temps d'observation adimensionné et  $\tau_q = T_q/T$  est le pas de temps d'inversion adimensionné. Dans cette analyse, nous fixons le pas de temps de recherche  $T_q$  et nous faisons varier uniquement le pas temporel d'observation  $T_c$ .

La Figure III.8-a permet d'évaluer la capacité du système de modélisation inverse à reproduire les variations temporelles du débit et la Figure III.8-b permet d'étudier l'aptitude du modèle à estimer la quantité de masse totale rejetée (ou le débit moyen). On observe sur la Figure III.8-a que les résultats de notre algorithme sont fortement sensibles aux pas de temps d'échantillonnage, quelle que soit la position du récepteur. En fait, dès que le pas de temps d'observation dépasse le pas de temps d'émission, les erreurs relatives maximales d'estimation de débit deviennent assez importantes pour toutes les positions de récepteurs. Ce résultat s'explique simplement par le théorème d'échantillonnage de Nyquist-Shannon qui, appliqué à notre cas, impose que le pas de temps d'observation adimensionné  $\tau_c$  soit inférieur à 1/2 pour décrire correctement les variations temporelles du signal de concentration. On peut cependant noter que le filtrage des données d'observation a moins d'impact sur les estimations si on s'intéresse seulement à la quantité totale de masse rejetée. On observe également sur la Figure III.8-b que la qualité d'inversion de la quantité de polluant rejetée est moins sensible aux pas de temps d'échantillonnage en s'éloignant de la source. Cela s'explique par l'effet de la distance parcourue par le panache sur la forme des signaux de concentration enregistrés, qui deviennent plus étalés et qui évoluent de manière plus homogène sur la majorité de la fenêtre temporelle de mesure en s'éloignant de la source de pollution (Figure III.5). Par contre, le lissage des signaux mesurés induit un manque d'informations qui sont nécessaires à la reconstruction de l'évolution détaillée du débit (la fréquence d'émission, les pointes de rejets,...). On constate sur la Figure III.9 que les valeurs des débits estimés sont bien dans le même ordre de grandeur que le débit réel, bien que les erreurs relatives maximales d'estimation présentées dans la Figure III.8-a dépassent 500% pour toutes les simulations effectuées avec  $\tau \geq 2$ . On remarque ainsi sur cette figure que les signaux de débit estimés deviennent de plus en plus lisses lorsque l'on utilise des pas d'échantillonnage plus grands. L'augmentation du pas temporel de sélection des mesures engendre implicitement un filtrage des données d'observation et par conséquent la perte d'informations nécessaires pour reproduire la fréquence réelle d'émission.

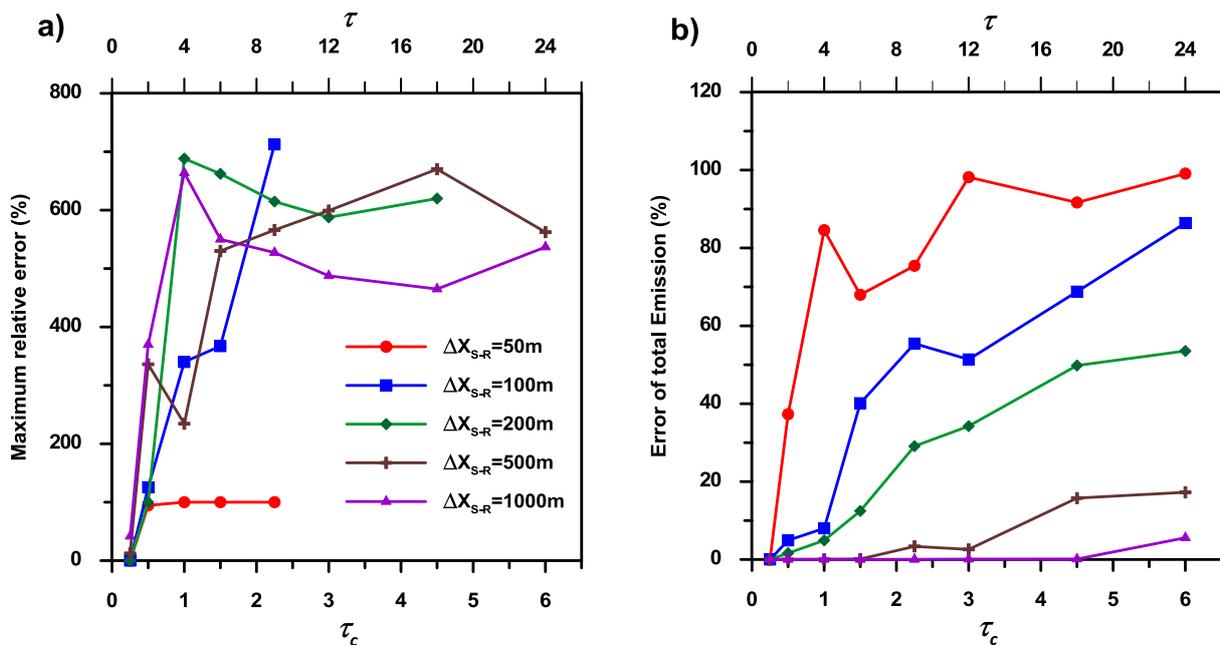


Figure III.8 : Variation des erreurs relatives maximales (a) et des erreurs relatives sur l'émission totale (b) par rapport à la grandeur adimensionnée  $\tau$  et  $\tau_c$ .

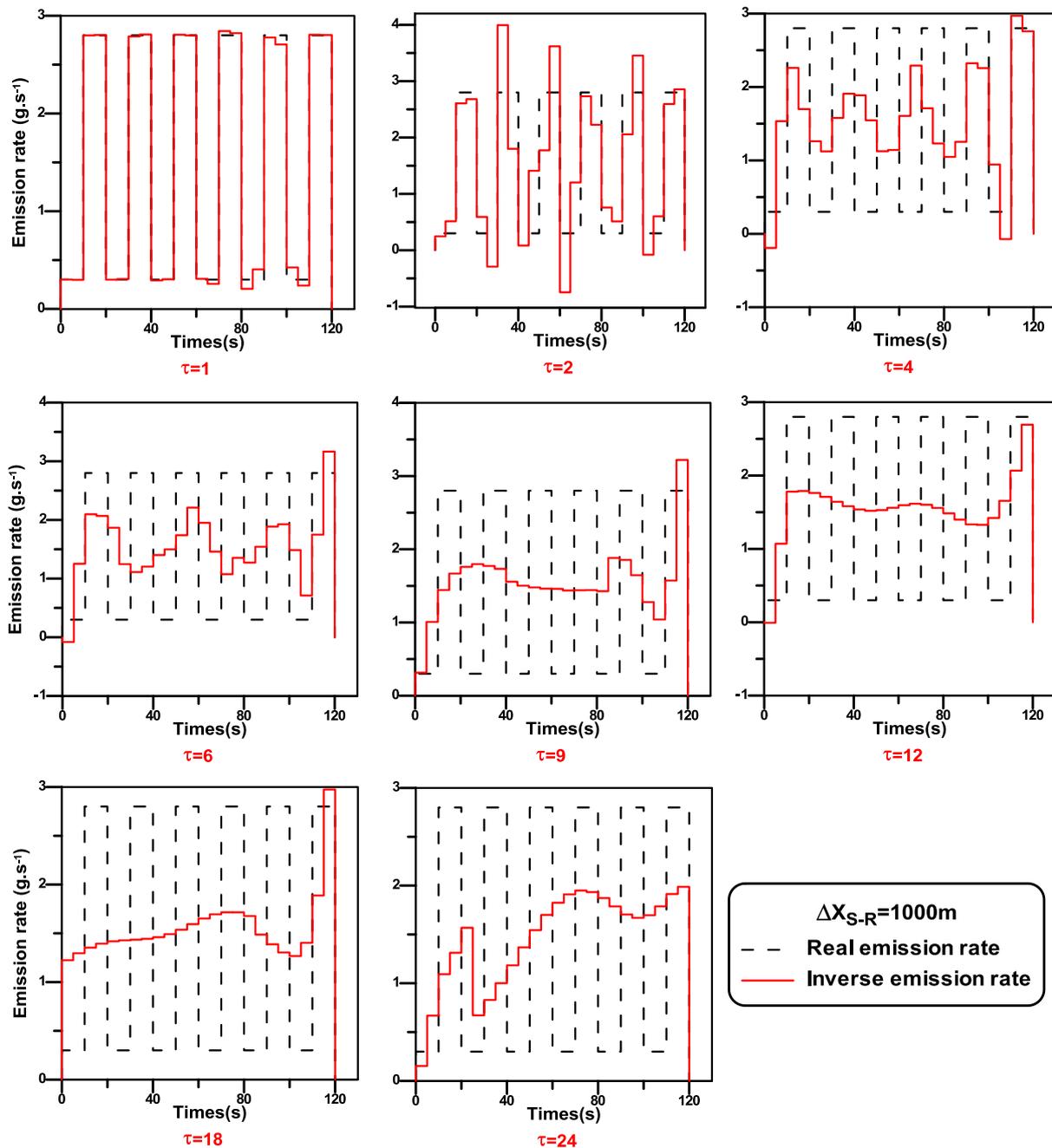


Figure III.9 : Comparaison entre le débit d'émission réel et les débits estimés par l'algorithme inverse pour plusieurs pas de temps d'observation. Le signal de concentration utilisé est mesuré à une distance de 1km de la source.

Pour clore l'étude de sensibilité au pas de temps d'observation, nous avons effectué les mêmes analyses en utilisant un débit stationnaire sur toute la période de calcul. La Figure III.10 illustre une comparaison des résultats d'estimation de débit pour différents pas de temps d'échantillonnage. Nous observons que la qualité d'inversion est quasi-parfaite pour des valeurs de  $\tau \leq 1$ . Cependant, les deux dernières figures de III.10 montre que la régularisation échoue pour les plus grandes valeurs de  $\tau$  comme illustré dans la Figure III.9.

Pour des applications réelles où nous ne disposons pas d'informations a priori sur le débit, il faut donc faire un choix judicieux de la fréquence de recherche du débit à estimer en étudiant les données d'observations disponibles. En effet, la formulation de ce problème inverse est parfaitement liée à la fréquence de recherche choisie et aux instants d'observation des mesures au niveau des récepteurs.

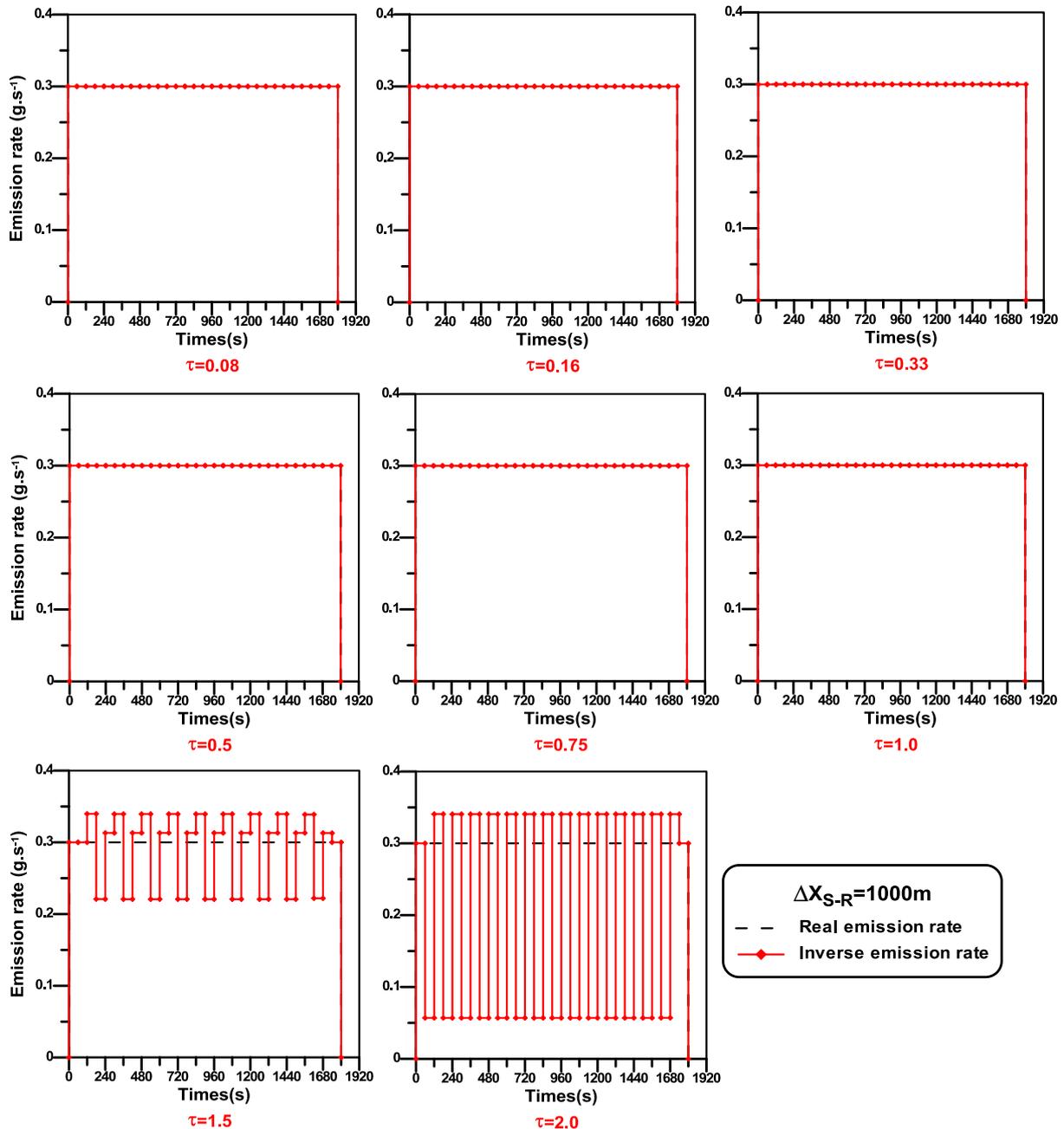


Figure III.10 : Comparaison entre le débit d'émission réel et les débits estimés par l'algorithme inverse en utilisant différents pas de temps d'observation. Le signal de concentration utilisé est mesuré à une distance de 1km de la source.

### III.2.3.4. Sensibilité à la direction du vent

Dans l'optique d'étudier la qualité des résultats de cet algorithme dans des situations météorologiques réelles, nous avons effectué une analyse de sensibilité par rapport à la déviation de la direction du vent  $\Delta\theta$ . Nous avons construit les vecteurs d'observations synthétiques avec des simulations par SIRANERISK pour trois récepteurs en déviant à chaque fois la direction du vent avec un pas  $\Delta\theta$  allant de  $0^\circ$  à  $30^\circ$ . Après avoir calculé les matrices de contribution  $CTA$  pour  $\theta=0^\circ$  pour chaque position des récepteurs, nous appliquons l'algorithme inverse pour remonter aux débits d'émission. Dans cette étude, la matrice  $CTA$  est calculée en supposant que la direction du vent est fixe à  $\theta=0^\circ$  et les observations synthétiques utilisées sont calculées à différentes direction du vent. Cela nous permet d'étudier la fiabilité du système de modélisation inverse à reproduire les paramètres source en l'absence de mesures météorologiques précises, comme c'est le cas dans la plupart des cas pratiques. Les Figures III.11-a et III.11-b illustrent respectivement l'évolution des erreurs relatives maximales et des erreurs relatives sur l'émission totale en fonction de  $\Delta\theta$ , en utilisant trois signaux mesurés chacun à une distance différente de la source. Cette analyse de sensibilité met en évidence deux principaux résultats concernant l'influence de la déviation de la direction du vent sur la qualité de l'inversion. Tout d'abord, on constate que les tendances générales de l'évolution des  $ERM$  ou des  $ERQM$  sont assez similaires, quelle que soit la position des récepteurs par rapport à la source. En revanche, il faut noter que les ordres de grandeur des erreurs relatives maximales sont fortement sensibles aux positions des récepteurs et aux variations de  $\Delta\theta$ . La Figure III.11-a montre que la variation logarithmique de ces erreurs est quasiment identique pour des récepteurs loin de la source. De même, sur la même figure, on constate que les valeurs des erreurs sont beaucoup plus faibles en utilisant des récepteurs assez proches de la source. Sur la Figure III.11-b, nous remarquons que l'influence de la variation de la direction du vent sur la qualité de l'inversion de la quantité totale de masse rejetée est quasiment identique pour toutes les positions de récepteurs.

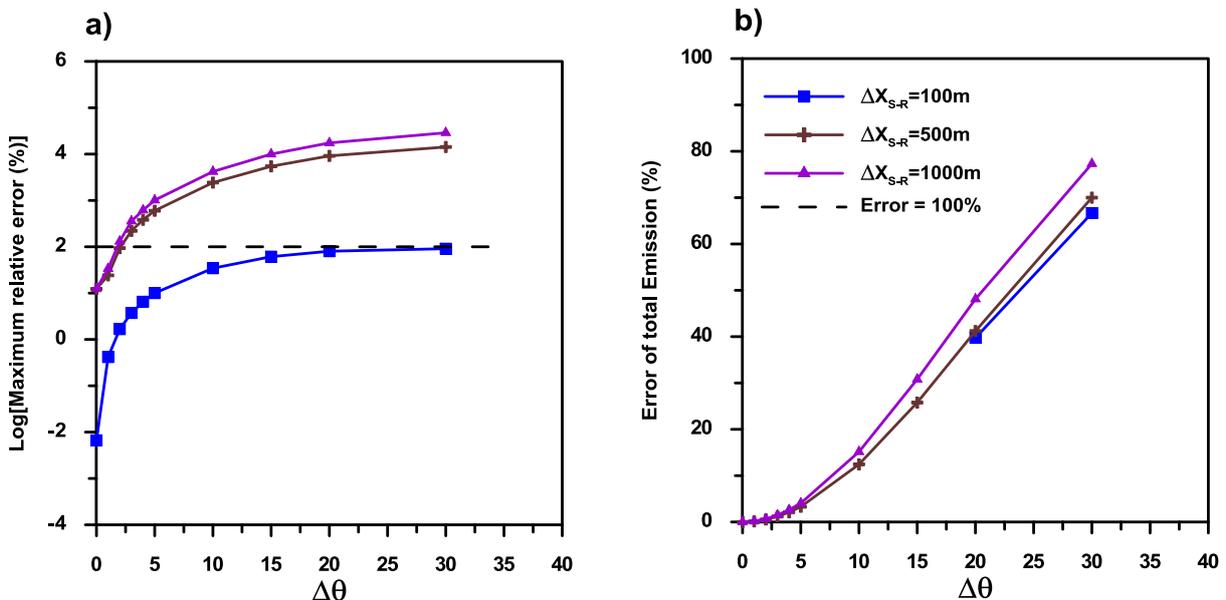


Figure III.11 : Variation des erreurs relatives maximales (a) et des erreurs relatives des émissions totales (b) par rapport à la variation des déviations de la direction de vent  $\Delta\theta$ .

Pour des applications réelles, cette étude de sensibilité montre que notre algorithme est apte à reproduire les émissions totales avec une erreur de 20%, quelle que soit la position des récepteurs,

si les erreurs d'observation de la direction du vent ne dépassent pas 10°. Néanmoins, pour bien reproduire les fréquences réelles des signaux d'émission, il faut que le récepteur soit assez proche de la source et que les données d'observation des directions de vent soient assez fiables puisqu'un écart de 3° par rapport à la direction du vent réel peut provoquer des erreurs relatives maximales de 100%. Nous considérons que les résultats présentés ci-dessus ne sont valables que dans notre cas d'étude et en particulier sous les conditions de dispersion adoptées dans le code direct SIRANERISK. Les erreurs relatives maximales d'estimation sont fortement élevées (La Figure III.11a) parce que chaque variation de la direction de vent, même inférieure à 5°, peut provoquer des conséquences majeures sur les signaux de concentration comme montré dans (Khlaifi, 2007). Cependant cette variation dépend d'un récepteur à l'autre suivant sa position par rapport à la source de pollution.

### III.2.3.5. Bruitage du signal d'observation

Afin de clore l'étude de sensibilité de notre algorithme inverse, nous avons étudié dans cette partie la fiabilité de l'algorithme inverse au bruitage des signaux d'observation à différentes distances de la source. Les signaux de concentration utilisés dans les paragraphes précédents étaient tous synthétiques et fictifs, fournis directement par des simulations du modèle direct de dispersion atmosphérique SIRANERISK. Ils ne reflétaient pas la réalité pratique où les erreurs sur les observations ne sont pas nulles. Nous avons donc testé la fiabilité de cet algorithme en appliquant respectivement deux types de bruitage différents : un bruit blanc gaussien (III.2-50) (Figure III.12-a) et un biais par amplification (III.2-51) (Figure III.12-b).

$$C^{obs} = C^{obs} + C^{obs} \times Randn * X(\%) \quad (III.2-50)$$

$$C^{obs} = C^{obs} + C^{obs} * X(\%) \quad (III.2-51)$$

où  $X$  est l'amplitude de bruitage et  $Randn$  est la fonction qui génère le bruit blanc gaussien.

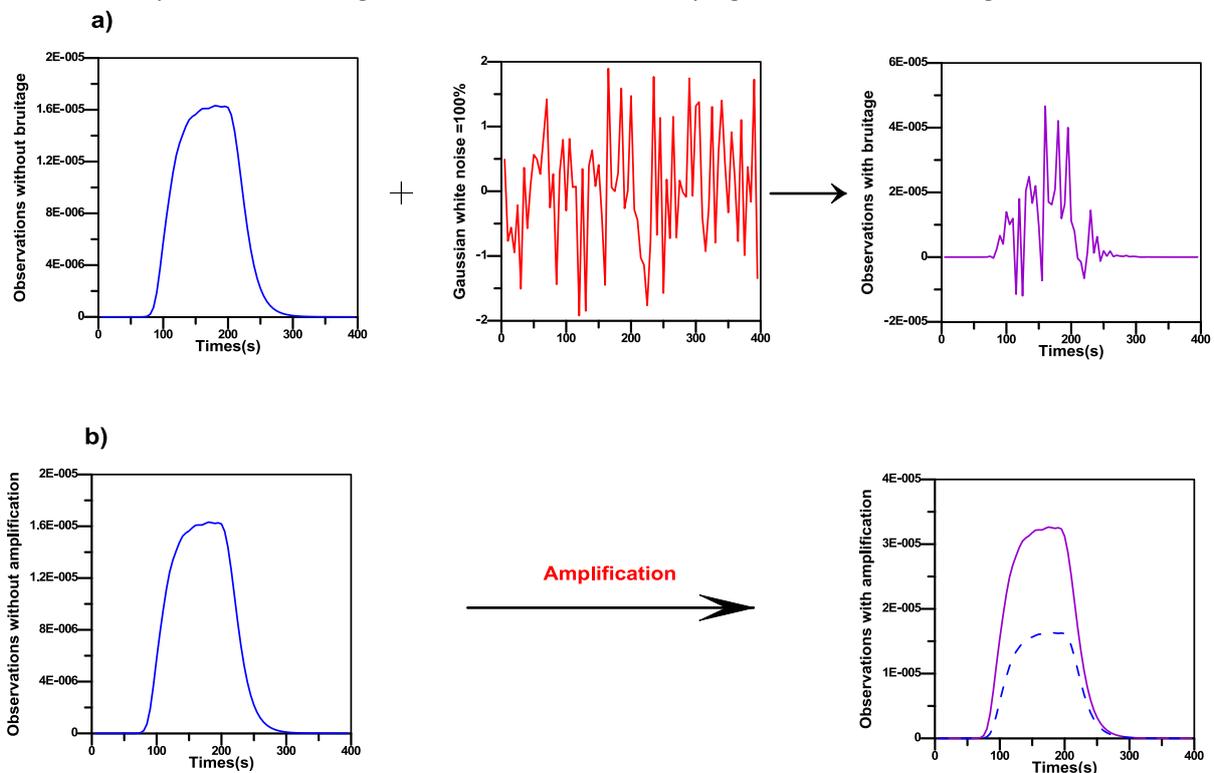


Figure III.12 : Types de bruitage appliqués sur les signaux de concentration : (a) bruit gaussien blanc et (b) biais par amplification des signaux.

Les Figures III.13 et III.14 illustrent l'évolution des erreurs relatives maximales et des erreurs sur la quantité d'émission totale en appliquant respectivement des bruits blancs gaussiens et des signaux d'observation amplifiés à différentes amplitudes. Nous remarquons que le modèle est fortement sensible aux bruitages appliqués sur les signaux de concentration mesurés loin et près de la source. Les erreurs relatives maximales d'estimation de débit proches de la source sont cependant beaucoup plus faibles. D'autre part, il faut noter que le comportement de cet algorithme par rapport au biais par amplification est assez homogène. En effet, les évolutions des erreurs relatives maximales sont quasi-linéaires par rapport au facteur d'amplification (Figure III.14-a) et l'évolution des erreurs sur la quantité de masse est presque identique quelle que soit la position des récepteurs (Figure III.14-b). Cela s'explique par le principe d'inversion et par la linéarité entre l'émission totale et les concentrations. En fait, pour les mêmes coefficients de contribution (même matrice *CTA*), l'amplification des observations va reproduire implicitement le même facteur multiplicatif sur la quantité totale de masse rejetée.

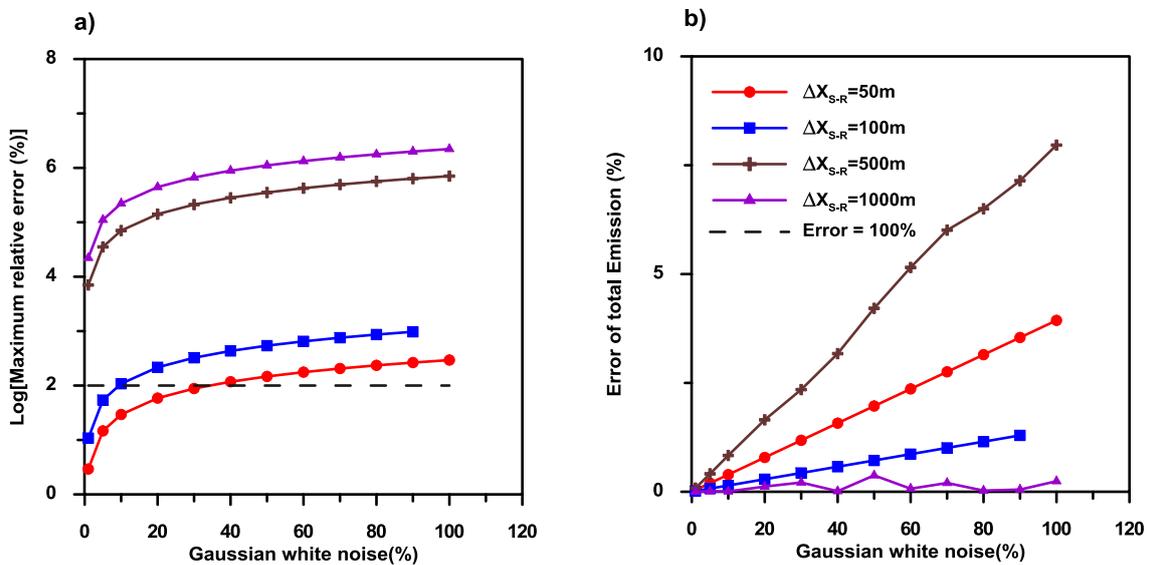


Figure III.13 : Variation des erreurs relatives maximales (a) et des erreurs relatives des émissions totales (b) par rapport aux bruits gaussien appliqués sur les signaux d'observation utilisés dans l'inversion.

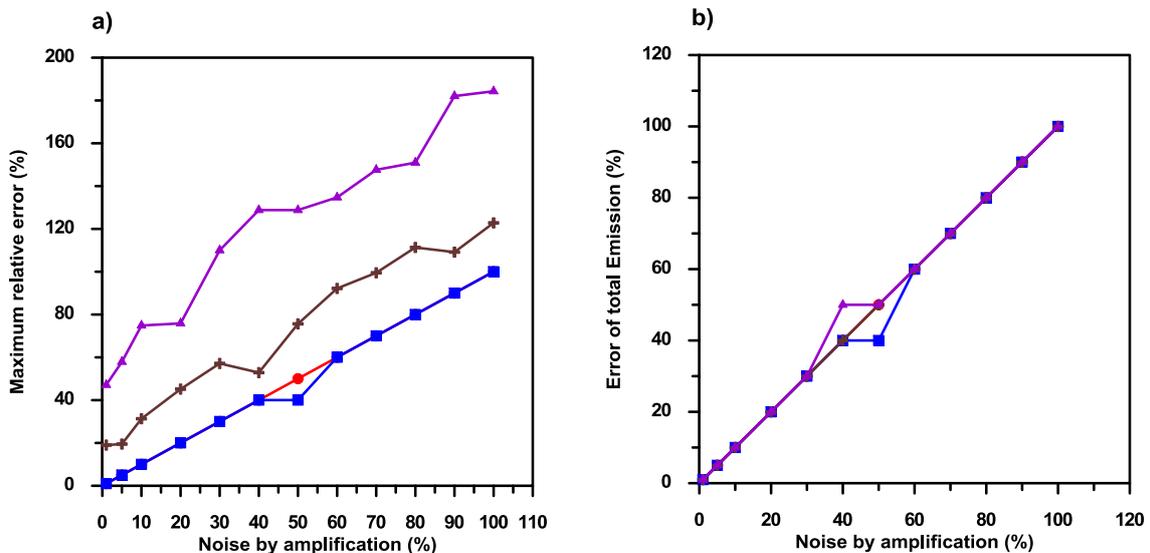


Figure III.14 : Variation des erreurs relatives maximales (a) et des erreurs relatives des émissions totales (b) par rapport au biais par amplification appliqués sur les signaux d'observation utilisés dans l'inversion.

Pour résoudre ce type de problème, nous pouvons appliquer la méthode de régularisation développée et présentée dans III.2.2.3.4. Cette approche de régularisation permet de mieux gérer les phénomènes de bruitage et les erreurs d'observation. La détermination des coefficients de régularisation a été réalisée par la méthode de L-curve (Calvetti et al., 2000; Engl et Grever, 1994; Hanke, 1996; Hansen et O'Leary, 1993; Hansen, 2000a, 1992; Zhu et al., 2011a) au moyen d'un algorithme itératif qui permet de déterminer la meilleure valeur de  $\varepsilon$  en traçant l'évolution logarithmique de  $\|Q\|$  en fonction  $\|C^{obs} - CTA \times Q\|$  (Figure III.15-a). Cette méthode d'estimation de L-curve a été largement utilisée pour des applications d'inversion liées à la dispersion atmosphérique (Davoine et Bocquet, 2007; Krysta et al., 2008; Winiarek et al., 2012). On s'intéresse dans la suite, seulement à compenser les bruitages blancs gaussiens.

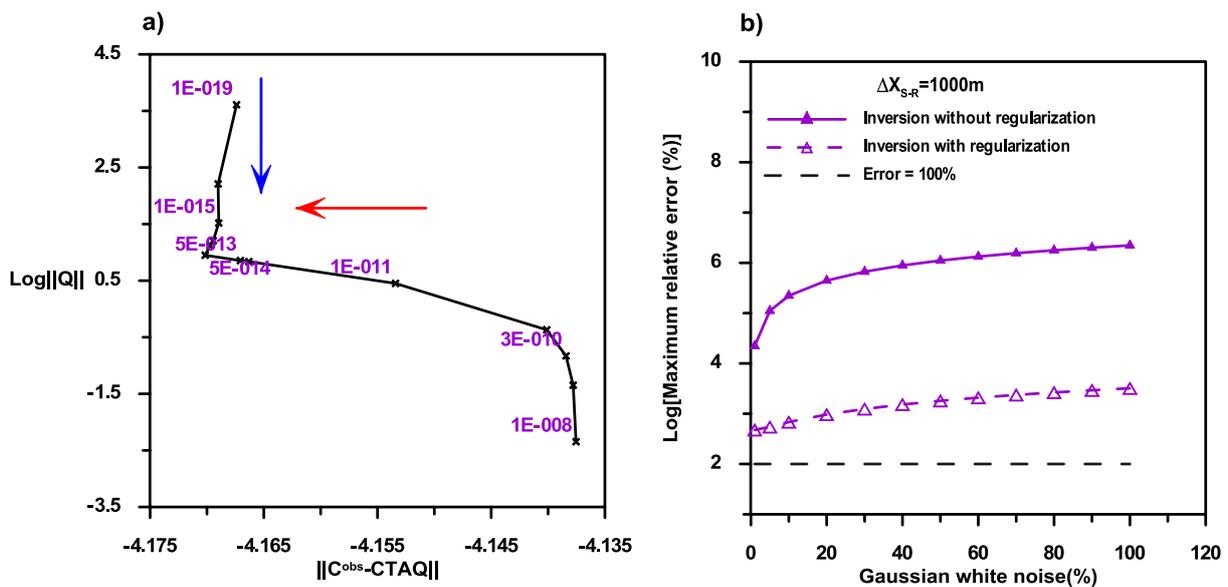


Figure III.15 : Application de la méthode de régularisation de Thikonov. (a) courbe L-curve (b) évolution des erreurs relatives maximales en fonction du bruitage gaussien avec et sans régularisation.

La meilleure valeur de  $\varepsilon$  est celle qui correspond au « coude » de la L-curve (Hansen, 1992). L'objectif est de choisir  $\varepsilon$  qui minimise à la fois la norme de la quantité de masse  $\|Q\|$  (flèche bleue sur la Figure III.15-a) et la norme de  $\|C^{obs} - CTA \times Q\|$  (flèche rouge sur la Figure III.15-a).

Après avoir fixé  $\varepsilon = 3.10^{-10}$ , nous calculons la solution donnée par la relation (III.2-49). On constate sur la Figure III.15-b que cette méthode permet de réduire énormément les erreurs d'inversion. En effet, pour une distance de 1000m de la source, les erreurs relatives maximales utilisant la régularisation de Thikonov deviennent 500 fois moins importantes que celles n'utilisant pas le modèle de pénalisation. Bien que l'ordre de grandeur des erreurs relatives maximales reste relativement élevé, les résultats sont considérés comme acceptables. La Figure III.16 illustre une comparaison qualitative de l'ordre de grandeur des débits d'émission estimés (inversés) respectivement sans (Figure III.16-a) et avec (Figure III.16-b) la méthode de régularisation. Les résultats fournis par la méthode de régularisation sont considérés comme très satisfaisants (Figure III.16-b) dans la mesure où la recherche de débit d'émission de la source a été effectuée sans avoir d'informations a priori et avec un bruitage des signaux d'observation relativement fort (jusqu'à 40%).

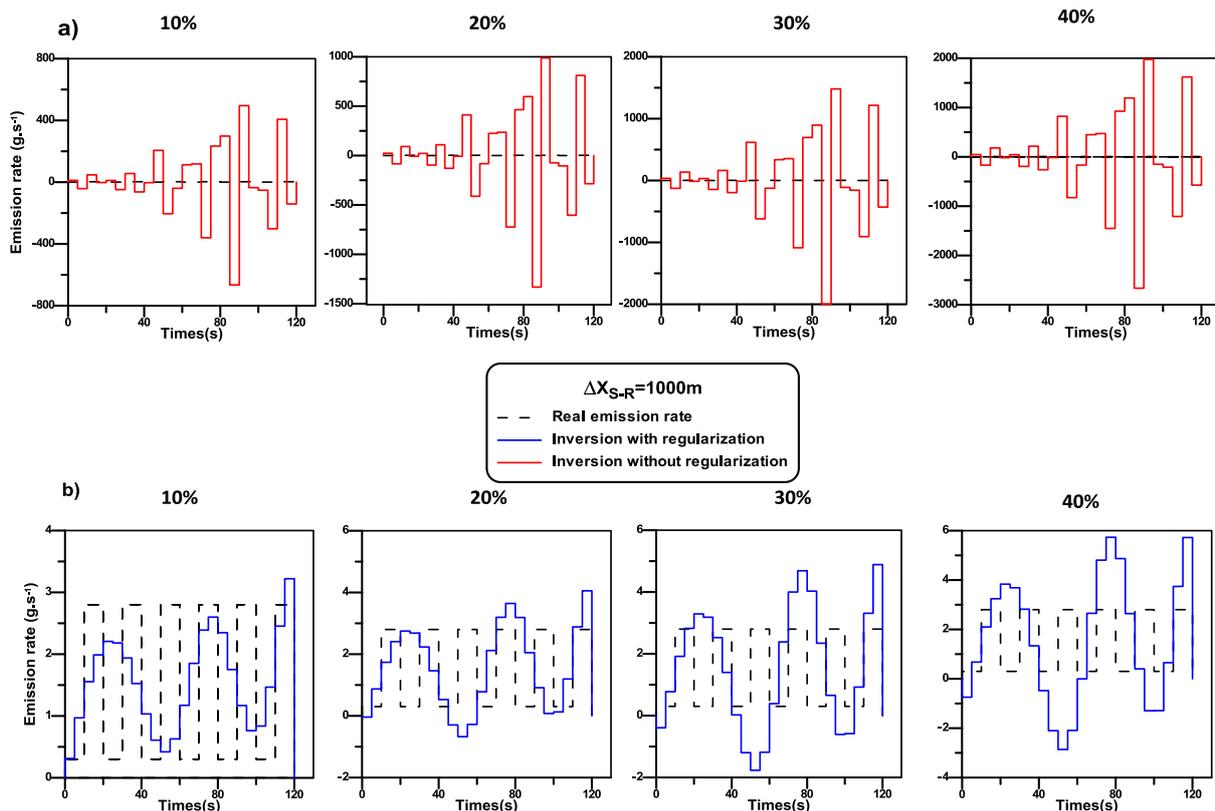


Figure III.16 : Comparaison qualitative entre le débit d'émission réel et les débits estimés par l'algorithme inverse sans (a) et avec (b) la régularisation quadratique en appliquant un bruit gaussien de 10% à 40% (de gauche à droite). Le signal de concentration de base utilisé dans cette étude est mesuré à une distance de 1km de la source.

### III.2.4. Conclusion

Bien que le système de modélisation inverse développé dans cette étude repose sur plusieurs méthodes d'optimisation adaptées au traitement des différents types de problèmes, il est incapable dans certains cas de reproduire correctement l'évolution instantanée des débits d'émission. Cet algorithme peut cependant être considéré comme robuste pour prédire la quantité totale d'émission dans un temps relativement court, comme d'autres méthodes de résolution basées sur des techniques de moindres carrés linéaires (Jeong et al., 2005; Lushi et Stockie, 2010). Malgré la complexité et l'efficacité de certaines techniques d'optimisation utilisées dans l'inversion, dans la pratique il n'y a aucune méthode qui permette de traiter tous les types de problèmes inverses (Rezoug, 2012) parce qu'aucun algorithme d'optimisation « n'est meilleur que l'autre » (Wolpert et Macready, 1997). Néanmoins, certaines approches sont considérées plus adaptées que d'autres pour traiter une telle application. Pour cela, nous avons effectué une étude de sensibilité détaillée pour identifier les limites d'application de notre algorithme en supposant que la position de la source est connue. Nous présenterons dans la partie suivante un algorithme hybride capable d'identifier la position et le débit d'émission d'une source de pollution sans avoir de données a priori.

### III.2.5. Références

- Alifanov, O.M., Artiukhin, E.A., Rumyantsev, E.S.V., 1995. Extreme Methods for Solving Ill-Posed Problems With Applications to Inverse Heat Transfer Problems. Begell House.
- Allen, C.T., Young, G.S., Haupt, S.E., 2007. Improving pollutant source characterization by better estimating wind direction with a genetic algorithm. Atmos. Environ. 41, 2283–2289.

- 
- Askan, A., Akcelik, V., Bielak, J., Ghattas, O., 2010. Parameter sensitivity analysis of a nonlinear least-squares optimization-based anelastic full waveform inversion method. *Comptes Rendus Mécanique* 338, 364–376.
- Aster, R.C., Thurber, C.H., Borchers, B., 2005. *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Academic Press.
- Backus, G.E., Gilbert, J.F., 1967. Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems. *Geophys. J. Int.* 13, 247–276.
- Ben Salem, N., Soulhac, L., Salizzoni, P., Armand, P., 2013. Inverting time dependent concentration signals to estimate pollutant emissions in case of accidental or deliberate release.
- Bennett, A.F., 2002. *Inverse modeling of the ocean and atmosphere*. Cambridge University Press, Cambridge, UK; New York.
- Bocquet, M., 2005. Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. I: Theory. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 131, 2191–2208.
- Bocquet, M., 2010. Modélisation inverse des sources de pollution atmosphérique accidentelle : progrès récents. *Pollut. Atmos.*
- Bruneau, J.M., Blanc-Feraud, L., Barlaud, M., 1991. Opérateurs de régularisation en restauration d'image : Calculs et comparaisons.
- Calvetti, D., Morigi, S., Reichel, L., Sgallari, F., 2000. Tikhonov regularization and the L-curve for large discrete ill-posed problems. *J. Comput. Appl. Math.* 123, 423–446.
- Cervone, G., Franzese, P., 2010. Monte Carlo source detection of atmospheric emissions and error functions analysis. *Comput. Geosci.* 36, 902–909.
- Chan, T.F., 1982. An Improved Algorithm for Computing the Singular Value Decomposition. *ACM Trans Math Softw* 8, 72–83.
- Chang, J., Hanna, S.R., 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys* 87, 167–196.
- Chonavel, T., 2011. Notes de cours d'analyse numérique et d'optimisation continue. Note de cours de Telecom Bretagne.
- Cullum, J., 1979. The effective choice of the smoothing norm in regularization. *Math. Comput.* 33, 149–170.
- Engl, H.W., Grever, W., 1994. Using the L-curve for determining optimal regularization parameters.
- Golub, G., Kahan, W., 1965. Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix. *J. Soc. Ind. Appl. Math. Ser. B Numer. Anal.* 2, 205–224.
- Hadamard, J., 1915. *Four Lectures on Mathematics*. Columbia University Press.
- Hanke, M., 1996. Limitations of the L-curve method in ill-posed problems. *BIT Numer. Math.* 36, 287–301.
- Hansen, P.C., 1987. The truncatedSVD as a method for regularization. *BIT Numer. Math.* 27, 534–553.
- Hansen, P.C., 1992. Analysis of Discrete Ill-posed Problems by Means of the L-curve. *SIAM Rev* 34, 561–580.
- Hansen, P.C., 2000. The L-Curve and its Use in the Numerical Treatment of Inverse Problems, in: *In Computational Inverse Problems in Electrocardiology*, Ed. P. Johnston, *Advances in Computational Bioengineering*. WIT Press, pp. 119–142.
- Hansen, P.C., O'Leary, D.P., 1993. The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete Ill-Posed Problems. *SIAM J. Sci. Comput.* 14, 1487–1503.
- Hazart, A., Giovannelli, J.-F., Dubost, S., Chatellier, L., 2014. Inverse transport problem of estimating point-like source using a Bayesian parametric method with MCMC. *Signal Process.* 96, Part B, 346–361.
- Issartel, J.-P., Sharan, M., Singh, S.K., 2012. Identification of a Point of Release by Use of Optimally Weighted Least Squares. *Pure Appl. Geophys.* 169, 467–482.
- Jeong, H.-J., Kim, E.-H., Suh, K.-S., Hwang, W.-T., Han, M.-H., Lee, H.-K., 2005. Determination of the source rate released into the environment from a nuclear power plant. *Radiat. Prot. Dosimetry* 113, 308–313.

- Kanasewich, E.R., Chiu, S.K., 1985. Least-squares inversion of spatial seismic refraction data. *Bull. Seismol. Soc. Am.* 75, 865–880.
- Kathirgamanathan, P., Mckibbin, R., Mclachlan, R.I., 2003. Source release rate estimation of atmospheric pollution from a non-steady point source – Part 2: Source at an unknown location. *Res Lett Inf Math Sci* Vol.5, 85–118.
- Khlaifi, A., 2007. Estimation des sources de pollution atmosphérique par modélisation inverse. Thèse de doctorat de l'Université de Paris XII. Université de Paris XII.
- Klema, V., Laub, A.J., 1980. The singular value decomposition: Its computation and some applications. *IEEE Trans. Autom. Control* 25, 164–176. doi:10.1109/TAC.1980.1102314
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Kuhn, H.W., Tucker, A.W., 1951. *Nonlinear Programming*. Presented at the Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, The Regents of the University of California.
- Lewis, J.M., Derber, J.C., 1985. The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints. *Tellus A* 37, 309–322.
- Lewis, J.M., Lakshmvarahan, S., Dhall, S., 2006. *Dynamic Data Assimilation: A Least Squares Approach*. Cambridge University Press.
- Lines, L. r., Treitel, S., 1984. A Review of Least-Squares Inversion and Its Application to Geophysical Problems\*. *Geophys. Prospect.* 32, 159–186.
- Lushi, E., Stockie, J.M., 2010. An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple point sources. *Atmos. Environ.* 44, 1097–1107.
- Maalej, T., 2010. Caractérisation d'une source de polluant en aéraulique à partir d'inversion de mesures de concentrations. Thèse de doctorat. Institut National Polytechnique de Lorraine.
- Marro, M., Nironi, C., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2013. A Lagrangian stochastic model for estimating the high order statistics of a fluctuating plume in the neutral boundary layer. Presented at the 15th international conference on harmonisation within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, 6-9 May 2013, Madrid, Spain, Madrid, Spain.
- Neumaier, A., 1998. Solving Ill-Conditioned And Singular Linear Systems: A Tutorial On Regularization. *SIAM Rev.* 40, 636–666.
- Rezoug, M., 2012. MODELISATION ET OPTIMISATION DES INONDATIONS URBAINES AVEC UNE APPROCHE MULTICRITERES. Thèse de doctorat. Université d'Évry Val D'Essonne, Université d'Évry Val D'Essonne.
- Richardson, R.M., Zandt, G., 2009. *Inverse problems in geophysics*. (No. GEOS 567). University of Arizona, Tucson, Arizona 85721.
- Roussel, G., Delmaire, G., Ternisien, E., Lherbier, R., 2000. Separation problem of industrial particles emissions using a stationary scattering model. *Environ. Model. Softw.* 15, 653–661.
- Rudd, A.C., Robins, A.G., Lepley, J.J., Belcher, S.E., 2012. An Inverse Method for Determining Source Characteristics for Emergency Response Applications. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 1–20.
- Sharan, M., Singh, S.K., Issartel, J.P., 2012. Least Square Data Assimilation for Identification of the Point Source Emissions. *Pure Appl. Geophys.* 169, 483–497.
- Shenefelt, J.R., Luck, R., Taylor, R.P., Berry, J.T., 2002. Solution to inverse heat conduction problems employing singular value decomposition and model-reduction. *Int. J. Heat Mass Transf.* 45, 67–74.
- Singh, S.K., Sharan, M., Issartel, J.-P., 2013. Inverse Modelling for Identification of Multiple-Point Releases from Atmospheric Concentration Measurements. *Bound.-Layer Meteorol.* 146, 277–295.
- Tikhonov, A.N., Arsenin, V.Y., 1977. *Solutions of Ill-posed Problems*, Translation Edition. ed. Halsted Press Book, Washington, DC.
- Wolpert, D.H., Macready, W.G., 1997. No free lunch theorems for optimization. *IEEE Trans. Evol. Comput.* 1, 67–82.

- 
- Zhang, T. (Tim), Yin, S., Wang, S., 2013. An inverse method based on CFD to quantify the temporal release rate of a continuously released pollutant source. *Atmos. Environ.* 77, 62–77.
- Zhu, Y., Sun, L., Xu, H., 2011. L-Curve Based Tikhonov's Regularization Method for Determining Relaxation Modulus From Creep Test. *J. Appl. Mech.* 78, 031002–031002

---

## **Quatrième partie**

# **Application de la modélisation inverse dans les milieux complexes**

---



## **IV.1. Application de la modélisation inverse pour reconstruire les émissions de rejets accidentels à partir de signaux temporels de concentration**

---

*Dans ce chapitre, nous testons la fiabilité de notre algorithme inverse pour estimer une émission instantanée de polluant atmosphérique dans une couche limite turbulente et dans un quartier idéalisé. Après avoir décrit les outils utilisés dans l'inversion, nous discutons la fiabilité de notre algorithme inverse à reproduire les débits d'émission à l'échelle locale en se fondant sur la méthode de L-curve pour estimer les paramètres de la méthode de régularisation. Cette analyse a été réalisée en utilisant des signaux instantanés et des moyennes d'ensemble des concentrations. Les données d'observation sont des mesures de concentration qui ont été réalisées dans la soufflerie atmosphérique de l'Ecole Centrale de Lyon. A la fin de ce chapitre, nous présentons une comparaison entre quatre méthodes différentes d'estimation des paramètres de régularisation afin d'appliquer correctement la méthode de Tikhonov.*

---

### **IV.1.1. Introduction**

L'estimation de la quantité des polluants rejetés est un élément indispensable afin de prendre les meilleures décisions pour réduire leurs impacts sur l'environnement. Ceci peut être réalisé en appliquant la modélisation inverse qui utilise des concentrations mesurées et des modèles de dispersion atmosphérique. La plupart des approches de modélisation atmosphérique directe utilisées reposent sur des modèles qui ne permettent d'accéder qu'à une moyenne d'ensemble du comportement du panache instationnaire de polluant. Malheureusement, la moyenne d'ensemble ne permet pas de décrire les concentrations observées sur une réalisation particulière. D'autre part, la limitation capitale de cette approche est que cette notion de « moyenne d'ensemble » n'est pas pertinente pour traiter des rejets accidentels de courte durée (associées aux accidents industriels et aux attentats) qui n'arrivent qu'une seule fois dans des conditions de vent et de turbulence correspondant à une unique réalisation.

Dans cette section, nous cherchons à évaluer les propriétés statistiques de l'erreur obtenue en appliquant notre système de modélisation inverse afin de discuter de sa fiabilité à des fins opérationnelles. Les essais de recherche des débits d'émissions instantanées ont été effectués dans différentes configurations : sans et avec d'obstacles (couche limite turbulente ou quartier idéalisé), en utilisant comme mesures (observations) les signaux réels turbulents de concentration. Pour cela, nous utilisons des expériences effectuées par Cierco et al. (2008) dans la soufflerie atmosphérique de l'Ecole Centrale de Lyon. Ces expériences simulent la dispersion de bouffées relatives au rejet instantané de polluant sous différentes configurations. Pour chaque position fixe de récepteur, une centaine de réalisations a été effectuée et tous les signaux temporels de concentration ont été enregistrés. Ces signaux individuels ont été utilisés dans la suite comme données d'entrée pour notre algorithme inverse afin d'évaluer l'erreur dans son estimation de l'émission réelle de polluant. L'inversion a également été effectuée en utilisant la moyenne de l'ensemble de tous les signaux (100 signaux pour chaque récepteur) en tant que donnée d'entrée. La comparaison de ces deux approches nous permet de discuter la fiabilité de notre algorithme inverse dans des situations réelles en utilisant des modèles de dispersion atmosphérique basés sur la notion de la moyenne d'ensemble.

## IV.1.2. Outils d'application

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, l'application de la modélisation inverse nécessite obligatoirement d'autres outils indispensables, en plus de l'algorithme inverse, pour assurer une bonne estimation des paramètres. Nous utilisons dans cette étude des mesures de concentration effectuées en soufflerie comme observations et le modèle SIRANERISK comme modèle physique direct de dispersion atmosphérique.

### IV.1.2.1. Observations : Essais de Cierco et al. (2008)

Les mesures expérimentales utilisées dans cette section sont celles présentées par Cierco et al. (2008) et réalisées dans la grande soufflerie de l'équipe AIR du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon.

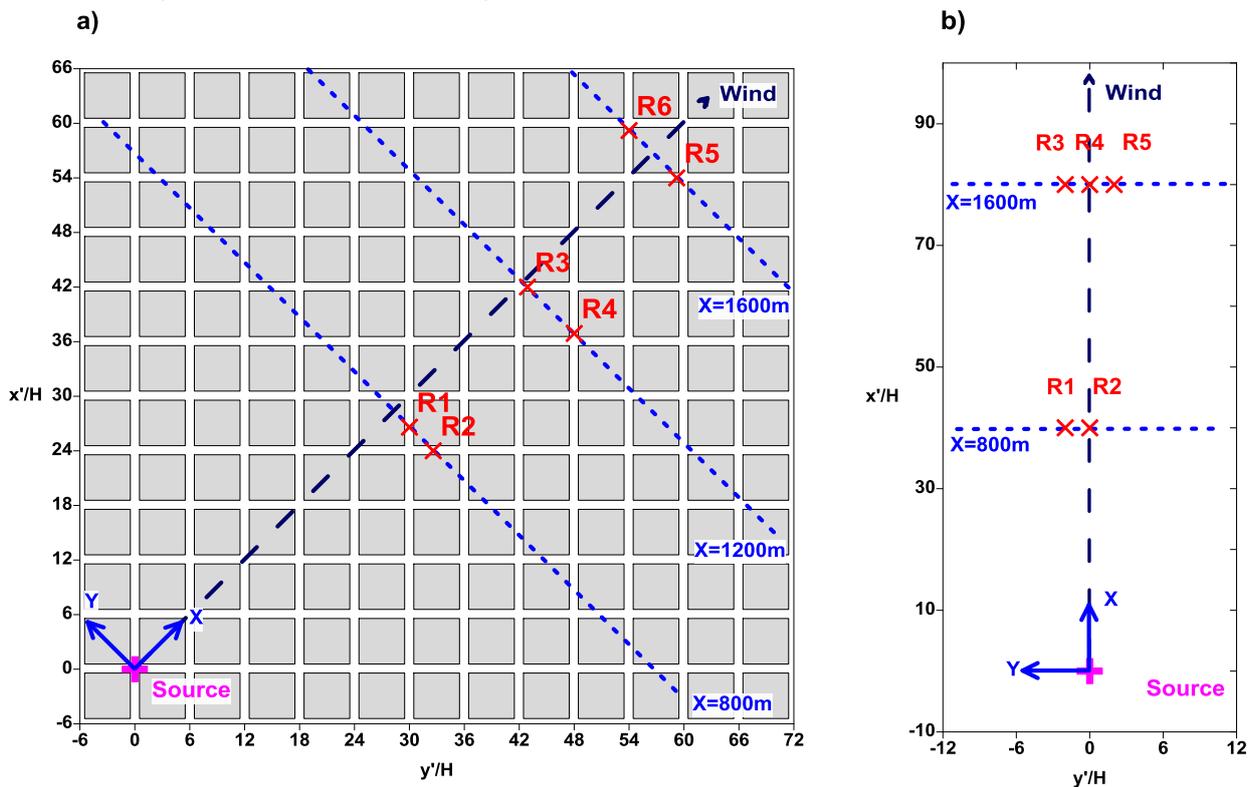


Figure IV.1 : Positions de la source (en rose) et des différents récepteurs (en rouge) utilisés dans l'inversion pour les deux configurations expérimentales B45 (a) et R20 (b).

Nous rappelons ici que :

- Les campagnes de mesure en soufflerie ont été effectuées respectivement sur des configurations de sol rugueux (Figure IV.1-b) et sur une maquette de quartier idéalisé (Figure IV.1-a). Cela permet d'étudier la fiabilité de l'algorithme inverse à reproduire un débit instationnaire de courte durée dans un écoulement de couche limite turbulente rugueuse sans obstacle et dans un écoulement urbain caractérisé par un quartier idéalisé placé sous la direction de vent  $\theta=45^\circ$ .
- Le rejet instationnaire a été assuré par un vérin rejetant la même quantité d'éthane (polluant) pour chaque réalisation. La durée de rejet est de 0,17s représentant dans l'atmosphère une émission de 68s à une échelle de 1:400.
- Les rejets sont répétés une centaine de fois pour chaque point d'observation en aval de la source afin d'effectuer des statistiques sur un grand nombre de réalisations.

#### IV.1.2.2. Modèle physique direct : SIRANERISK

Dans cette partie, le modèle de prévision physique SIRANERISK (Cierco et al., 2010; Lamaison et al., 2011a, 2011c) a été couplé à notre approche inverse afin de reconstruire le débit de la source simulée dans les expériences. Ce modèle opérationnel de dispersion atmosphérique est capable de reproduire les différents phénomènes physiques et les effets locaux des écoulements dans un réseau des rues. Le chapitre II.2 de ce manuscrit présente en détail ce modèle et sa validation avec les mesures expérimentales citées ci-dessus. Cette validation est un préalable essentiel car les erreurs des modèles de prévision font partie de l'erreur globale compensée dans les estimations des paramètres de la source par la méthode inverse.

Nous rappelons brièvement que :

- Le réseau de rues du quartier est représenté dans SIRANERISK comme un entrecroisement de segments, le modèle SIRANERISK utilisant les mêmes paramétrages que le modèle SIRANE (Soulhac et al., 2011).
- SIRANERISK repose sur trois principaux mécanismes de transport dans la canopée urbaine : transfert turbulent de polluants entre la canopée et la couche limite sus-jacente (Soulhac et al., 2013b), canalisation des polluants le long des axes de rue et échanges de polluants aux intersections de rues.
- Le modèle SIRANERISK utilise un modèle d'advection qui lui permet de fournir des concentrations moyennées spatialement et temporellement à l'intérieur de chaque tronçon de chaque rue canyon (voir le chapitre (II.2)).
- L'écoulement de la couche limite sus-jacente est modélisé par la théorie de similitude de Monin-Obukhov. La dispersion est traitée par un modèle à bouffées gaussiennes généralisées intégrant un modèle de cisaillement apte à reproduire la dispersion et l'étalement longitudinal des bouffées.
- SIRANERISK inclut un modèle de transformation radioactive (décroissance et filiations des radioéléments) et un modèle de doses chimiques qui permet de simuler correctement les rejets accidentels de type NRBC (Nucléaires, Radiologiques, Bactériologiques, Chimiques) en milieu urbain. Ce modèle n'est pas activé dans cette étude.

#### IV.1.3. Recherche du débit d'une source connue

Dans cette partie, nous nous intéressons à identifier le débit d'émission réel à l'aide des signaux temporels de concentration au moyen de la méthode inverse présentée dans le chapitre précédent (III.2.2.3). Pour cela, nous faisons appel principalement à la méthode de régularisation quadratique qui nous permet d'atténuer le bruit des mesures. Les signaux instantanés mesurés en un point récepteur fixe pour chaque réalisation sont considérés dans ce cas comme des signaux bruités par rapport à l'évolution moyenne de tous les signaux (moyenne d'ensemble des 100 signaux). A titre d'exemple, nous avons illustré sur la Figure IV.2 une comparaison entre trois évolutions temporelles de la concentration en un point situé à 800 mètres en aval du rejet instantané, et la moyenne d'ensemble calculée sur 100 signaux instantanés de la concentration. On peut ainsi constater que les concentrations instantanées peuvent être 4 à 5 fois plus élevées que la moyenne d'ensemble (Figure IV.2) et que les temps d'arrivée ( $t_{beg}$ ) et de départ ( $t_{end}$ ) des bouffées (Figure IV.3) sont assez décalés par rapport au signal moyen de concentration. Ces décalages peuvent facilement atteindre dans certains cas une dizaine, voire une centaine de secondes (voir Tableau IV.1). L'enjeu de cette étude est donc de tester la fiabilité de la méthode inverse à reproduire le débit d'émission rejeté par une

source de position connue, en utilisant ce type de signaux mesurés. Cette analyse de sensibilité par rapport aux signaux temporels a été effectuée pour deux configurations différentes. La première correspond à un écoulement dans une couche limite atmosphérique (Figure IV.1-b) et la deuxième à un écoulement de couche limite au-dessus d'un quartier idéalisé en incidence de  $\theta=45^\circ$  par rapport à la direction du vent (Figure IV.1-a).

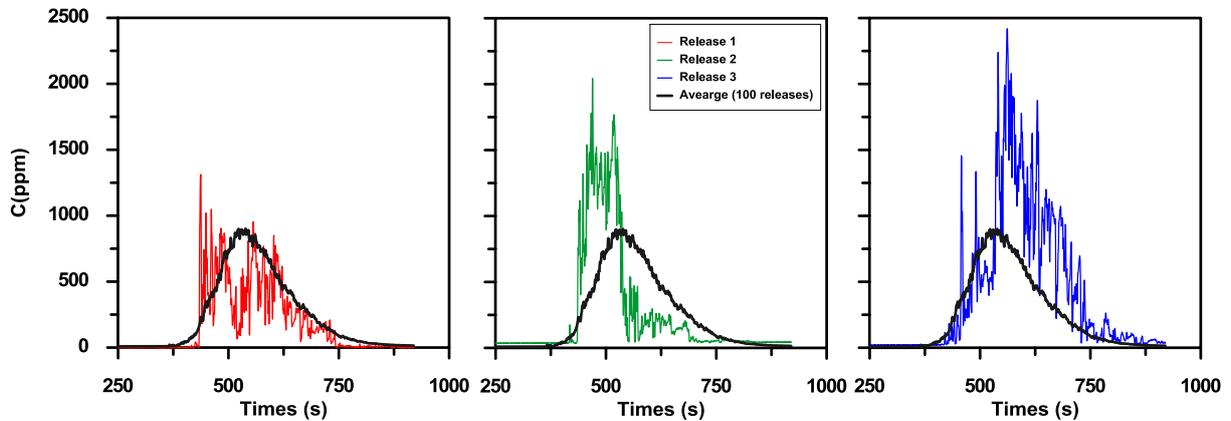


Figure IV.2 : Comparaison entre l'évolution de trois différents signaux temporels de concentration et la moyenne d'ensemble de 100 réalisations.

Pour chaque point récepteur indiqué sur la Figure IV.1 nous avons effectué simultanément une centaine d'inversion en prenant à chaque fois un signal temporel parmi ceux disponibles. Nous comparons ensuite ces résultats d'inversion avec le débit construit à l'aide de la concentration moyenne de tous les signaux mesurés. Dans cette étude, la source d'émission a été fixée dans toutes les configurations à la même hauteur ( $Z=10m$ ) et aux coordonnées ( $X=Y=0m$ ).

	$C_{max}(ppm)$	$t_{beg}(s)$	$t_{end}(s)$	$t_{max}(s)$
Réalisation 1	1312	434	612	437
Réalisation 2	2042	438	535	469
Réalisation 3	2419	457	649	561
Concentration moyenne	901	470	630	538

Tableau IV.1 : Comparaison entre les caractéristiques de trois signaux temporels de concentration avec la moyenne d'ensemble

L'évaluation de la performance de la méthode inverse pour reproduire les débits d'émission en utilisant des observations temporelles de concentration a été effectuée en utilisant deux types d'erreurs différentes, locales et globales. Pour quantifier les erreurs locales d'estimation, nous choisissons à la fois l'erreur relative instantanée maximale entre le débit réel et le débit inversé (estimé) (Figure IV.3-b) :

$$MER(\%) = \max \left( 100 \times \frac{|q_{true}^{t_i} - q_{est.}^{t_i}|}{q_{true}^{t_i}} \right) \quad (IV.1-1)$$

et l'erreur quadratique moyenne normalisée :

$$NMSE = \frac{\frac{1}{n} \sum_{t_i=1}^n (q_{true}^{t_i} - q_{est.}^{t_i})^2}{\frac{1}{n} \sum_{t_i=1}^n (q_{true}^{t_i}) \frac{1}{n} \sum_{t_i=1}^n (q_{est.}^{t_i})} \quad (IV.1-2)$$

Par ailleurs, pour évaluer l'erreur globale de cette méthode inverse, nous utilisons l'erreur relative sur les émissions totales (erreur relative sur la quantité de masse totale rejetée par la source) :

$$ERQM = \frac{\left( \int_{t_0}^{t_f} q_{true}^{t_i} \times \Delta t - \int_{t_0}^{t_f} q_{est.}^{t_i} \times \Delta t \right) \times 100}{\int_{t_0}^{t_f} q_{true}^{t_i}} \quad (IV.1-3)$$

qui ne fournit qu'une information globale de la qualité d'inversion car il ne représente que la différence entre la masse totale inversée et réelle éjectée (Figure IV.3-b).

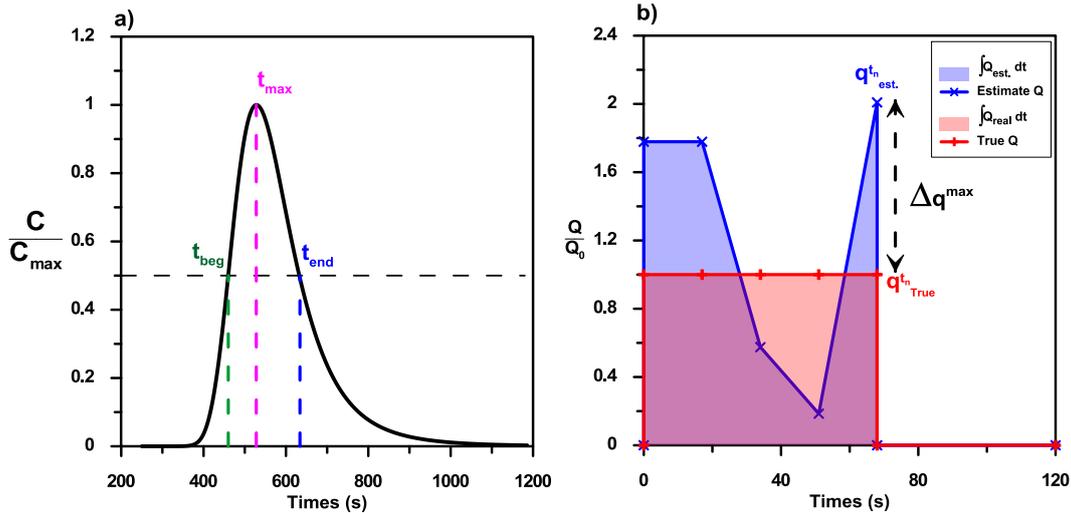


Figure IV.3 : (a) Définition du temps d'arrivée et de départ des bouffées. (b) Paramètres d'évaluation de la qualité d'estimation du débit par la méthode inverse.

### IV.1.3.1. Inversion sur sol rugueux

La recherche de débit dans cette partie est effectuée en aveugle sur une fenêtre temporelle qui est 5 fois plus importante que la durée de rejet considérée dans les expériences. On a adopté cette démarche pour se rapprocher des situations réelles (accidents, fuites,...), en supposant qu'on ne connaît ni la durée de rejet, ni la quantité de masse rejetée comme dans les situations de crises. Les essais d'inversion ont été effectués en utilisant à la fois des signaux d'observations synthétiques calculés par SIRANERISK (Figure IV.4, traits rouges) et les signaux de concentration moyennée mesurés en soufflerie (Figure IV.4, traits noirs). La Figure IV.5 illustre les résultats d'inversion en utilisant les observations fictives (à droite en rouge) et la moyenne d'ensemble mesurée en soufflerie (à gauche en bleu) en appliquant uniquement la méthode de moindres carrés classique sans régularisation. Nous observons sur les Figures IV.5-a et IV.5-c que la qualité d'inversion du débit d'émission est assez satisfaisante en utilisant les observations synthétiques de concentration. Les erreurs relatives maximales dans ce cas ne dépassent pas 13% et les erreurs relatives sur la masse totale rejetée sont quasiment nulles pour les deux distances de la source. Cependant, nous remarquons que la qualité de l'estimation de débit est moins bonne lorsque le récepteur est plus proche de la source, ce qui n'était pas le cas dans l'étude de sensibilité effectuée dans la section (III.2.3.2). En effet, nous avons montré que les erreurs d'estimation de débits augmentent en fonction de la distance séparant les récepteurs et la source du fait que les signaux de concentration deviennent plus lisses (filtrés) loin de la source.

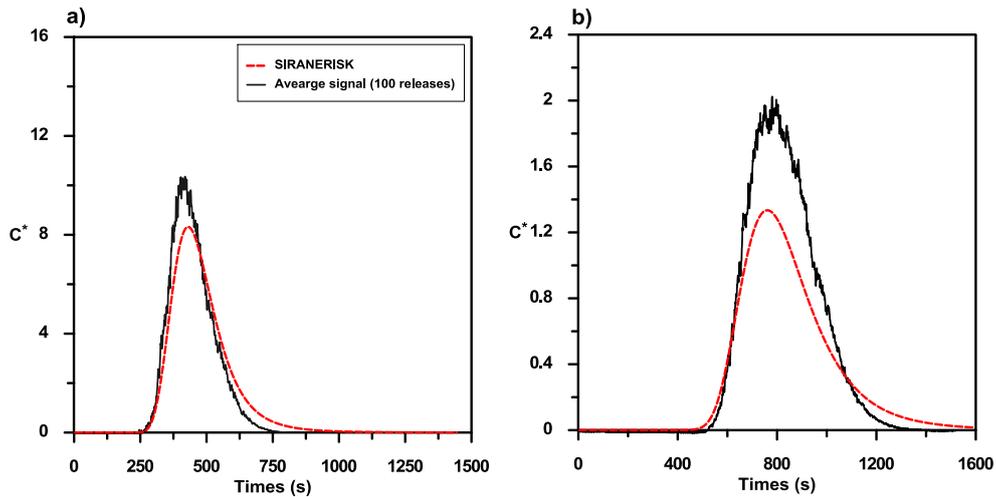


Figure IV.4 : Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$ , dans la configuration R20 avec un rejet instationnaire de polluant. Comparaison entre les mesures en soufflerie (en noir) et la concentration modélisée par SIRANERISK (en rouge) à  $X=800m$  (a) et à  $X=1600m$  (b).

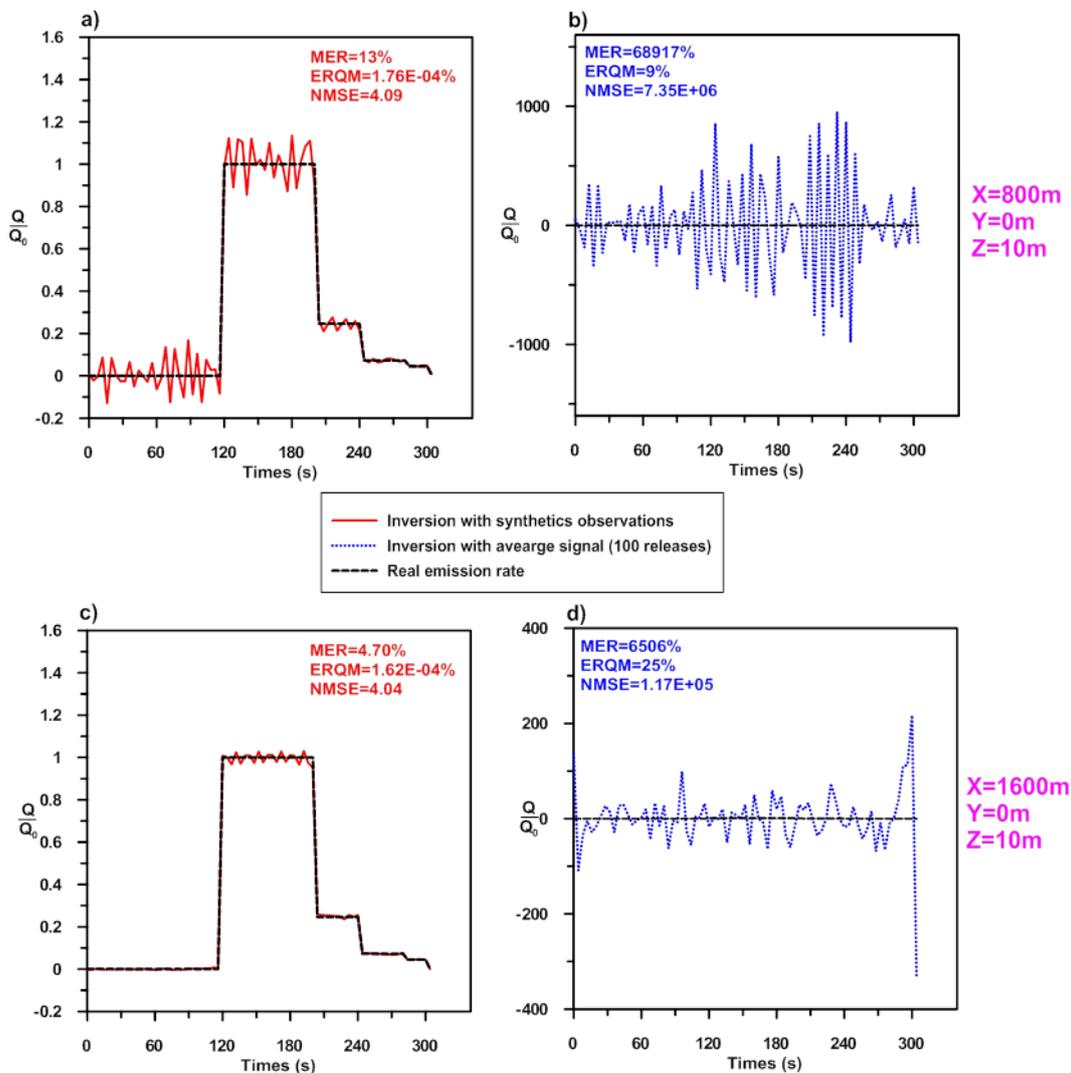


Figure IV.5 : Résultats d'inversion par la méthode des moindres carrés classique utilisant les valeurs d'observations synthétiques (en rouge) et les moyennes d'ensemble de concentration mesurée en soufflerie (bleu) à 800m (a, b) et à 1600m (c, d) de la source.

De même, pour un rejet instantané de courte durée, la qualité de l'inversion dépend à la fois de l'intensité de contribution de la source au niveau des récepteurs et de la séparation entre les contributions des instants d'émission. Cependant, en se référant aux travaux de recherche de Roussel et al. (2002) qui étudient la fiabilité des méthodes inverses par rapport aux formes de signaux à estimer, nous pouvons conclure que la fiabilité de la méthode inverse à reconstruire un signal périodique, de même type que celui utilisé dans l'étude de sensibilité dans (III.2.3.2), est fortement liée à la distance entre la source et les récepteurs.

La comparaison entre les débits inversés en utilisant les signaux de concentration moyennée et les débits réels, illustrée sur les Figures IV.5-b et IV.5-d, montre que les faibles décalages observés sur la Figure IV.4 entre la moyenne d'ensemble mesurée et les concentrations modélisées par SIRANERISK peuvent aboutir à des erreurs relatives assez importantes dans l'inversion en utilisant la méthode des moindres carrés classique sans contraintes (Figure IV.5). La solution au sens des moindres carrés est donc fortement sensible à toute variation des données d'observation et comme cela a été proposé par Tikhonov et Arsenin (1977), il nous faut pénaliser le problème pour atténuer l'effet du bruit. Bien évidemment, les erreurs d'estimation seront encore plus importantes en utilisant les signaux de concentration instantanée de chaque réalisation qui sont eux-mêmes assez décalés par rapport à la moyenne d'ensemble (Figure IV.2).

Pour assurer une meilleure qualité d'estimation, nous adoptons dans notre algorithme la méthode de régularisation quadratique de Tikhonov (III.2.2.3.4) en se fondant sur l'approche de L-curve pour estimer les paramètres de régularisation. Cette technique permet d'atténuer les effets d'amplification du bruit dans les signaux de concentration mesurés sur la qualité d'estimation du débit d'émission. Les moindres écarts entre les signaux de concentration expérimentale (moyennes d'ensemble) et les signaux modélisés (qui décrivent un modèle parfait) sont considérés comme du bruit lié aux données d'observation. D'autre part, cette méthode peut servir à régulariser nos estimations de débit lorsqu'on utilise les signaux temporels de concentration. La détermination des paramètres de régularisation a été effectuée comme discuté dans la section (III.2.2.3.4).

#### IV.1.3.1.1. Résultats d'inversion sur sol rugueux

Dans ce paragraphe, nous allons tester la fiabilité de notre algorithme en utilisant des concentrations mesurées (la moyenne d'ensemble et les signaux instantanés) à différents endroits en aval de la source comme le montre la Figure IV.1-b. Pour chaque récepteur, nous réalisons des statistiques sur la totalité des résultats d'inversion obtenus à partir de 100 débits inversés en utilisant des signaux instantanés de concentration de la même réalisation. Pour cela, nous comparons les PDF de trois critères différents calculés à partir des résultats d'inversion utilisant la moyenne d'ensemble et les signaux instantanés de concentration. Nous cherchons dans ces cas à reconstruire un débit avec un pas de temps de 4s et un pas de temps d'observation de 5s.

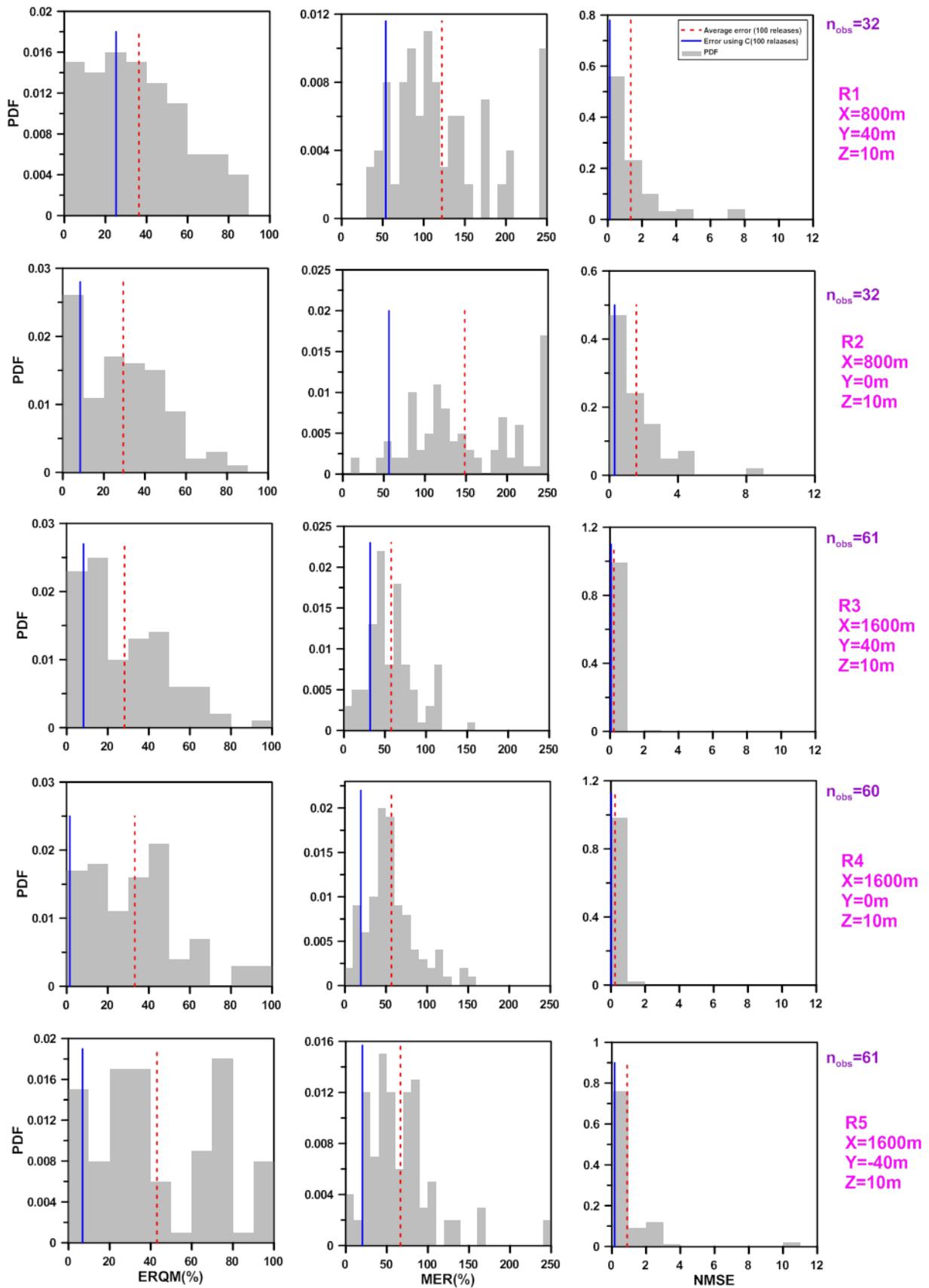


Figure IV.6 : Evolution des PDF des erreurs relatives, de la quantité de masse totale, des erreurs relatives maximales, et des NMSE pour la configuration de sol rugueux R20.

Les résultats d'inversion présentés sur la Figure IV.6 montrent que l'algorithme fournit globalement des informations assez satisfaisantes sur la quantité totale de masse rejetée dans l'atmosphère. En effet 80% des erreurs relatives sont inférieures à 20% en utilisant la moyenne d'ensemble. De même, les erreurs locales sur la forme des signaux de débit sont acceptables puisqu'environ 60% des essais d'inversion à l'aide des signaux instantanés ont des valeurs de  $NMSE \leq 1$  et des erreurs relatives maximales inférieures à 50% (Figure IV.6). Par ailleurs, nous observons que la qualité d'inversion est bien meilleure en utilisant des observations mesurées aux récepteurs plus loin de la source (R3 mieux que R1 et R4 mieux que R2). Ces résultats étaient prévisibles parce que le système de modélisation inverse reproduit dans ces résultats les erreurs de la modélisation directe. En effet, nous remarquons sur la Figure IV.7 que les décalages entre la moyenne d'ensemble des mesures et les concentrations modélisées par SIRANERISK sont plus élevées à  $X=800m$  que pour  $X=1600m$ , que ce soit pour  $Y=40m$  ou pour  $Y=0m$ .

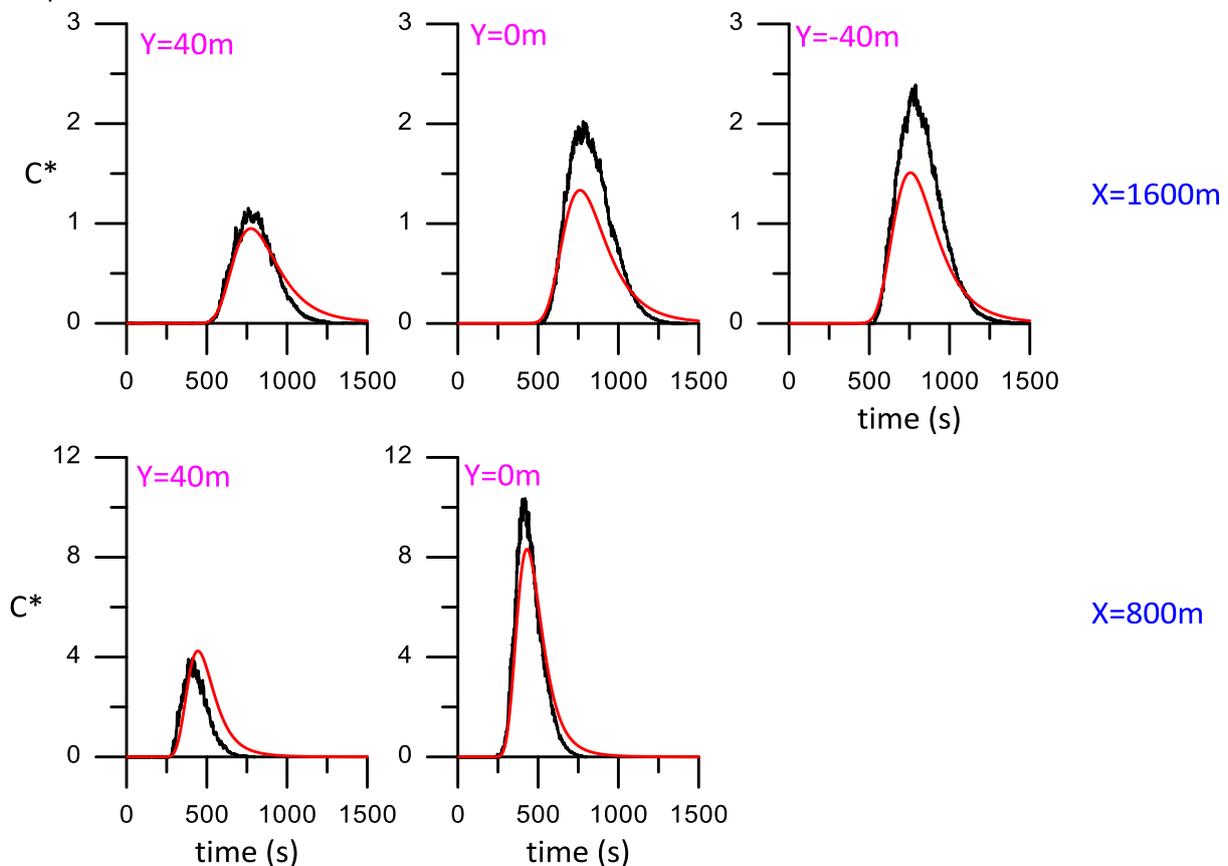


Figure IV.7 : Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à deux positions ( $X=1600m$  et  $X=800m$ ) en aval de la source dans la configuration R20 avec un rejet instationnaire de polluant. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle à bouffée gaussienne généralisée (en rouge)

Par ailleurs, la comparaison des résultats d'inversion en fonction des positions latérales des récepteurs (suivant la direction  $Y$ ) montre que les tendances globales des PDF sont assez similaires pour R1 et R2 en  $X= 800m$  et pour les récepteurs R3, R4 et R5 en  $X=1600m$ . Nous observons que pour deux récepteurs symétriques, les résultats d'inversion par leurs moyennes d'ensemble sont quasi-identiques, ce qui n'est pas le cas avec les signaux ponctuels de concentration. En effet, les statistiques sur les critères d'évaluation fournis par les mesures en R3 sont plus fiables que celles en R5.

#### IV.1.3.1.2. Etude de sensibilité

Avant de passer à l'évaluation de la fiabilité de cet algorithme d'inversion sur la configuration d'un quartier idéalisé (présenté sur la Figure IV.1-a), nous effectuons dans ce paragraphe, une analyse de sensibilité des résultats par rapport aux pas de temps d'observation (échantillonnage) et au pas de temps de recherche du débit, d'une manière similaire à celle réalisée pour les observations synthétiques dans la section (III.2.3). Pour cela nous traçons sur les Figures IV.8, IV.9 et IV.10, les fonctions densité de probabilité (PDF) des erreurs pour chaque pas de temps de recherche adopté. Chaque ligne de chaque figure correspond à un pas de temps d'échantillonnage différent. Les PDF ont été calculées par des statistiques sur les débits inversés par les signaux de concentration instantanés échantillonnés par le pas de temps d'observation choisi. Cette étude de sensibilité nous permet de nous rapprocher de situations réelles dans lesquelles le pas de temps d'émission est inconnu et le pas de temps d'observation peut être forcé par les instruments de mesure disponibles in situ. On observe sur les Figures IV.8-a, IV.9-a et IV.10-a que les erreurs relatives sur la masse totale ne dépassent pas 100% pour n'importe quelle valeur de  $\tau$  (éq.(III.2-49)). Mais la qualité des résultats est assez médiocre dès que les pas de temps d'observation deviennent deux fois plus grands que ceux de la recherche. En effet, pour  $\tau > 2$ , les erreurs relatives maximales illustrées sur les Figures IV.8-b, IV.9-b et IV.10-b sont toutes supérieures à 100%. Néanmoins, les valeurs de *NMSE* qui caractérisent les erreurs locales d'estimation peuvent être acceptables (inférieures à 4), même pour  $\tau > 2$ .

La comparaison entre la première PDF de la Figure IV.8-b, et celles des Figures IV.9-b et IV.10-b montre un comportement relativement étrange ou imprévu de la méthode inverse. On constate que pour la même qualité d'information d'entrée (même pas de temps d'observation), l'augmentation du pas de temps d'inversion ou de recherche de débit (diminution des dimensions de notre problème) provoque une diminution considérable des probabilités d'avoir des erreurs plus faibles que 50% en utilisant des signaux instantanés. Ainsi, les moyennes des erreurs (présentées en trait rouge interrompu) deviennent 2 à 4 fois plus importantes en diminuant la dimension du problème inverse. On observe sur les mêmes figures que l'utilisation de la moyenne d'ensemble fournit des erreurs plus faibles en diminuant les dimensions de problème c'est qui était tout à fait attendu.

D'autre part, nous remarquons que dans la plupart des cas, les résultats d'inversion trouvés pour la moyenne d'ensemble sont bien meilleurs que la moyenne des résultats inversés par les différents signaux instantanés de concentration. Néanmoins, au-delà d'une certaine valeur de  $\tau$ , nous constatons que les erreurs reproduites par la moyenne d'ensemble se rapprochent petit à petit de la moyenne des erreurs de l'inversion des signaux ponctuels.

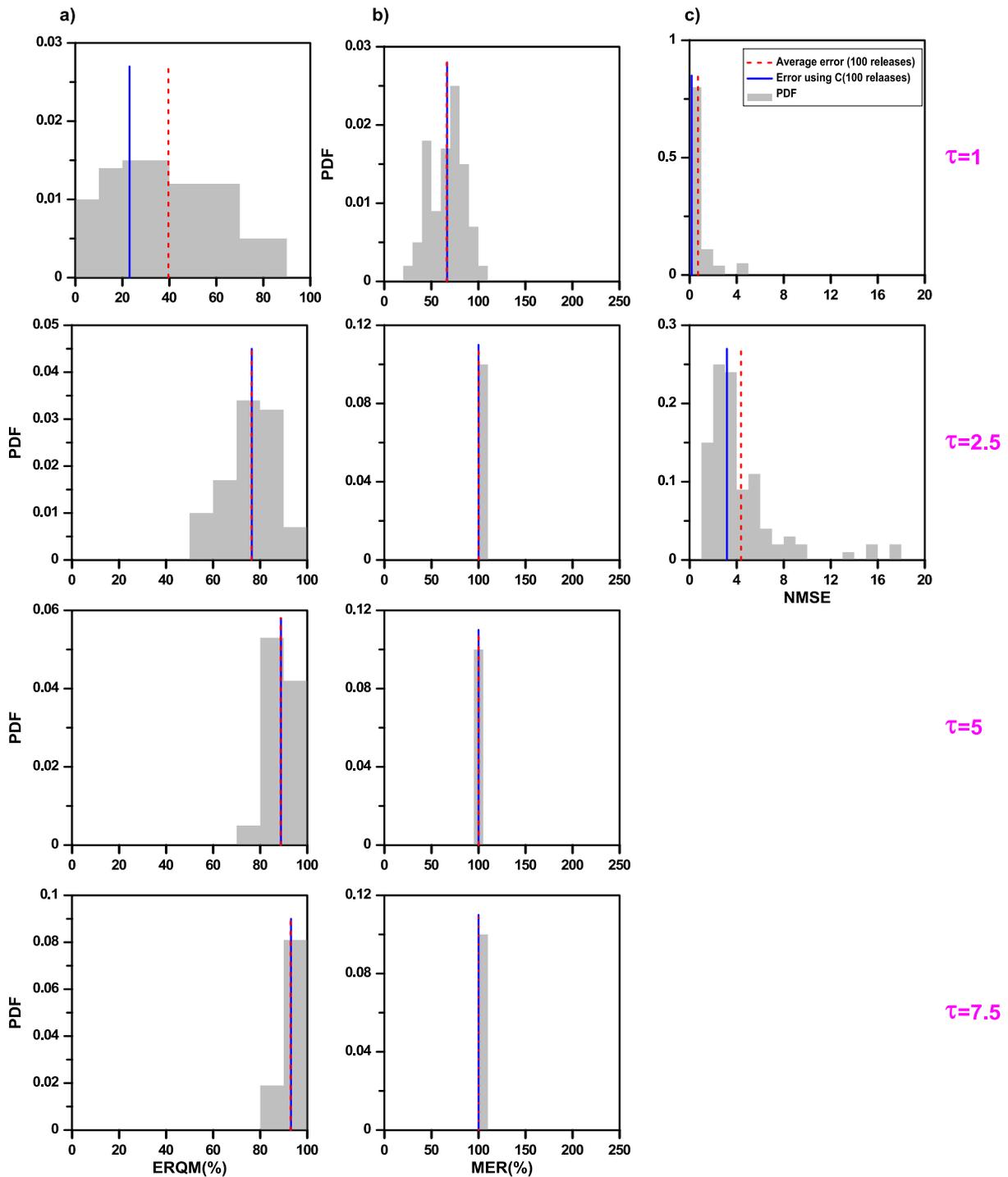


Figure IV.8 : Evolution des PDF des erreurs relatives de la quantité de masse totale (a), des erreurs relatives maximales (b) et des NMSE (c) pour un pas de temps d'inversion de débit  $T_q = 2s$ . Chaque ligne correspond à un pas de temps d'observation différent  $\tau$  (voir équation (III.2-49))

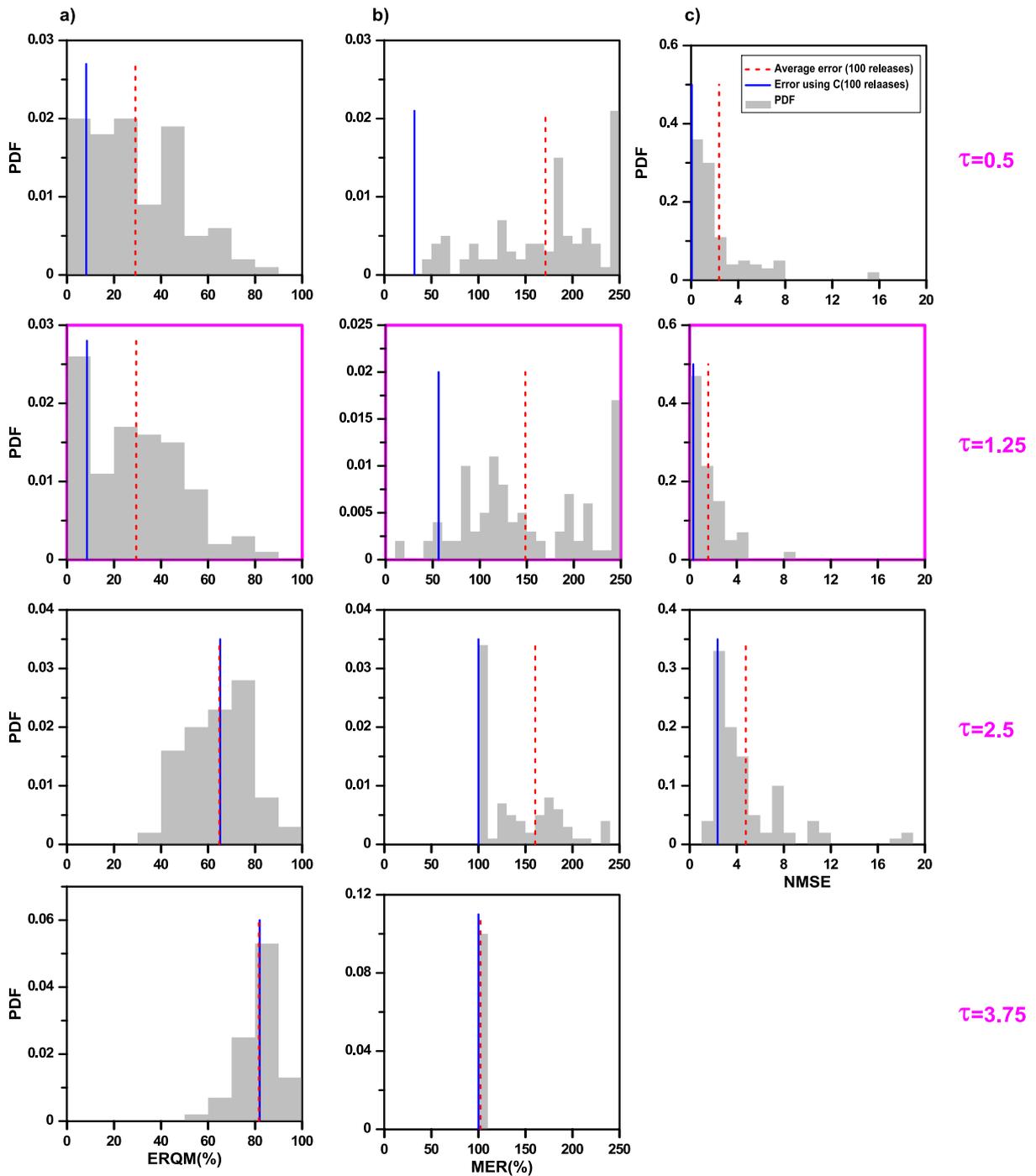


Figure IV.9 : Evolution des PDF des erreurs relatives de la quantité de masse totale (a), des erreurs relatives maximales (b) et des NMSE (c) pour un pas de temps d'inversion de débit  $Tq.= 4s$ . Chaque ligne correspond à un pas de temps d'observation différent  $\tau$  (voir équation (III.2-49))

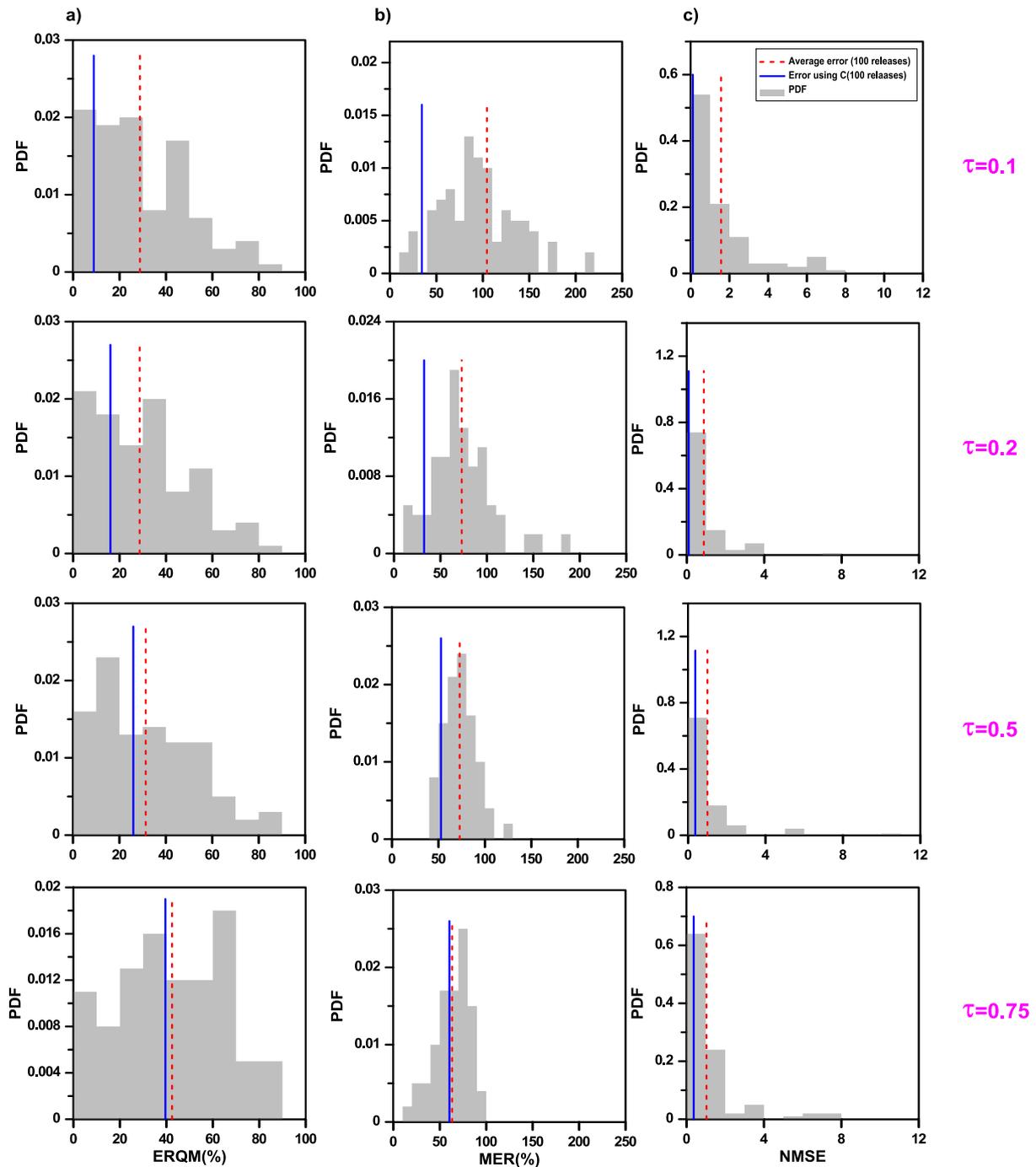


Figure IV.10 : Evolution des PDF des erreurs relatives de la quantité de masse totale (a), des erreurs relatives maximales (b) et des NMSE (c) pour un pas de temps d'inversion de débit  $T_q = 20s$ . Chaque ligne correspond à un pas de temps d'observation différent  $\tau$  (voir équation (III.2-49))

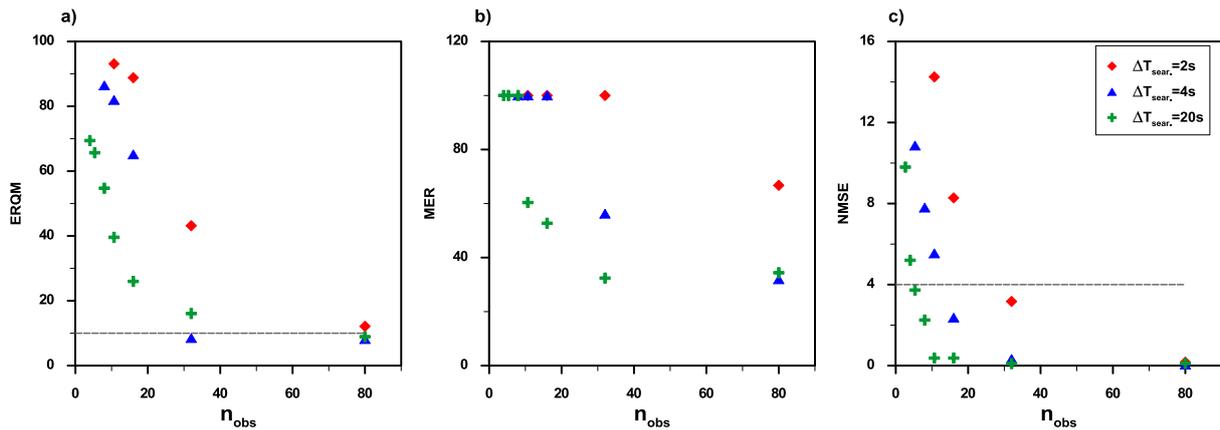


Figure IV.11 : Variations de l'ERQM (a), de NMSE (b) et de MER(c) obtenues en inversant les moyennes d'ensemble en fonction du nombre d'observations représentatives dans les signaux de concentration.

D'une manière générale on constate d'après l'analyse de ces figures (Figure IV.8, Figure IV.9 et Figure IV.10) que la qualité des résultats d'inversion diminue soit en réduisant le pas de temps de recherche, soit en augmentant le pas de temps d'observation. Le premier résultat peut être expliqué par les limites de la méthode à résoudre les problèmes de grandes dimensions avec peu des données. Le deuxième résultat peut être dû entre autre au nombre d'observations représentatives des signaux de concentration utilisées pour reproduire les débits dans l'inversion. La Figure IV.11 illustre les évolutions des différents paramètres utilisés (*ERQM*, *NMSE* et *MER*) en fonction du nombre d'observations entre le temps de départ et de fin de la bouffée (présentés sur la Figure IV.3-a) :

$$n_{obs} = \frac{\overline{t_{end}} - \overline{t_{beg}}}{\Delta t_{obs}} \quad (IV.1-4)$$

Nous pouvons achever cette étude de sensibilité par deux conclusions fondamentales qui sont bien illustrées sur la Figure IV.11 à travers les évolutions des trois critères d'évaluation par rapport au nombre d'observations représentatives. La première conclusion explique l'impact de la réduction des dimensions du problème inverse sur la qualité des résultats. On constate que pour chaque nombre d'observations, la fiabilité de l'algorithme devient de plus en plus médiocre en diminuant le pas de temps de recherche. Mais nous remarquons que ce comportement n'est pas assez homogène pour tous les  $n_{obs}$ . La deuxième conclusion concerne la fiabilité de la méthode par rapport au pas de temps d'observation ou d'échantillonnage. Nous remarquons que l'augmentation du pas de temps d'observation peut réduire considérablement le nombre d'observations représentatives utilisées dans l'inversion. Cela peut engendrer des erreurs assez importantes dans l'inversion parce que la qualité des informations utilisées dans la reconstruction du débit ne représente pas la totalité de la réalité physique de l'émission (cela peut exclure des valeurs de forte contribution). Bien que la tendance globale de l'évolution des courbes d'erreurs soit presque homogène, nous ne pouvons pas définir une valeur unique de  $n_{obs}$  qui peut satisfaire tous les critères pour tous les pas de temps de recherche de débit. Néanmoins, nous pouvons dire que pour 32 valeurs d'observations récupérées entre le temps de départ et le temps de fin, on peut avoir des résultats satisfaisants en termes de *NMSE* (Figure IV.11-c).

### IV.1.3.2. Inversion dans le quartier

Pour clore l'évaluation des performances de notre algorithme inverse à déterminer le débit d'émission instantané d'une source de pollution de position connue, en utilisant des observations expérimentales avec toute leur variabilité turbulente, nous présentons dans cette section des essais d'inversion à l'aide de mesures de concentration réalisées sur une configuration plus complexe que la précédente. Il s'agit des mesures effectuées sur une configuration de quartier idéalisé.

#### IV.1.3.2.1. Présentation des scénarios

Les simulations expérimentales utilisées dans ce paragraphe permettent de prendre en compte une grande partie de la complexité des écoulements et de la dispersion due aux spécificités de la topographie urbaine. Il s'agit de la même configuration (Figure IV.1-a) que celle utilisée par Garbero et al. (2010) sauf que l'objectif de ces expériences (Cierco et Soulhac, 2009b) est d'étudier les effets de la variabilité turbulente sur la dispersion des polluants à travers un rejet instantané de courte durée. Ce rejet de courte durée a été effectué à l'intérieur de la canopée urbaine (à  $H/2$ ) comme décrit dans (II.2.3.2). La source (Figure IV.1-a) est placée aux coordonnées réelles (0, 0, 10m) et les récepteurs sont à différentes positions en  $x$  et en  $y$  mais fixes en  $z$ . En effet, nous utilisons pour l'inversion seulement les observations réalisées aux récepteurs à l'intérieur de la canopée urbaine et précisément à une hauteur  $z=H/2$ , où  $H$  est la hauteur des bâtiments. Les emplacements de ces points de mesure peuvent être centrés sur les axes des rues ou se rapprochant des murs des bâtiments. Cela permet de voir en détail les effets locaux des écoulements dus à la présence des obstacles. Notre objectif dans ce paragraphe est de reproduire le débit d'émission à partir des moyennes d'ensemble ou des signaux instantanés de concentration comme dans la section précédente, et d'évaluer la performance de l'algorithme inverse face à la variabilité turbulente résultant de la nature de l'écoulement et de la présence des obstacles.



Figure IV.12 : Configuration B45 : Vue générale (à gauche) et disposition de la source (à droite)

#### IV.1.3.2.2. Résultats d'inversion dans un quartier idéalisé

Les comparaisons entre les résultats d'inversion utilisant des observations mesurées à différents points en aval de la source sont illustrées sur la Figure IV.13. Nous observons que la qualité du résultat est globalement satisfaisante voire encourageante pour certains récepteurs ( $X=1600m$ ), où les erreurs relatives ( $ERQM$  et  $MER$ ) ne dépassent pas 50% et les  $NMSE \leq 0.5$ , même avec des signaux instantanés de concentration. La fiabilité du système de modélisation inverse reste toujours plus importante en utilisant les moyennes d'ensemble, ce qui était attendu. D'autre part, on remarque sur la Figure IV.13 que la qualité des résultats d'inversion est beaucoup moins bonne en utilisant des concentrations mesurées proche de la source (à  $X=800m$ ) : pour cette distance, les PDF des  $NMSE$  sont plus étalées et dépassent 0.5 pour les deux cas (récepteurs R1 et R2). De même, les

erreurs d'inversion commises en utilisant les signaux moyens de concentration (moyennes d'ensemble) mesurés pour R1 et R2 sont plus importantes que celles obtenues pour les autres récepteurs. Cela peut s'expliquer par les écarts entre les résultats du modèle direct SIRANERISK et les mesures en soufflerie, représentés sur la Figure IV.14. En effet, on constate sur la même figure que les erreurs du modèle direct sont plus élevées pour  $X=800\text{m}$  que pour les autres points de mesure. Une grande partie des erreurs commises dans les résultats d'inversion est donc due aux erreurs de la modélisation directe. Par ailleurs, la même qualité des résultats d'inversion obtenue avec les mesures de deux points récepteurs R5 et R6 (à  $X=1600\text{m}$ ) peut s'expliquer par le fait que ces récepteurs sont parfaitement symétriques l'un et l'autre par rapport à l'axe Y qui correspond à la direction du vent. Néanmoins, les faibles décalages observés dans leurs PDF des erreurs et leurs résultats d'inversion (erreurs moyennes, erreurs des moyennes d'ensemble) peuvent être dus également à la qualité des résultats du modèle direct. En effet, les signaux de concentration expérimentaux et modélisés au point R6 ( $X=1600\text{m}$ ,  $Y=72\text{m}$ ) sont légèrement plus décalés par rapport à ceux du point R5 ( $X=1600\text{m}$ ,  $Y=-72\text{m}$ ), comme cela est illustré sur la Figure IV.14.

Enfin, nous avons représenté sur la Figure IV.15 les courbes classiques de L-curve et de l'évolution des courbures maximales pour chaque point récepteur utilisé dans l'inversion. Nous observons que les courbes de L-curve sont assez similaires l'une à l'autre pour tous les récepteurs utilisés. Cependant, chaque point de mesure se caractérise par une courbe de L-curve et de courbure maximale différente. De même nous remarquons que le point de courbure maximale n'est pas toujours au « coude » de la L-curve, comme le montre Hansen (1992), mais est souvent légèrement décalé vers la droite. Dans la section suivante, nous étudions la fiabilité de quatre méthodes différentes de sélection de paramètres de régularisation sur la qualité des résultats de l'inversion du débit d'une source de pollution atmosphérique avec l'approche de Tikhonov. Ces tests de sensibilité ont été effectués uniquement pour la configuration de sol rugueux (R20), en utilisant la moyenne d'ensemble et les signaux de concentrations instantanés mesurés pour un seul récepteur ( $X=800\text{m}$ ,  $Y=0\text{m}$ ).

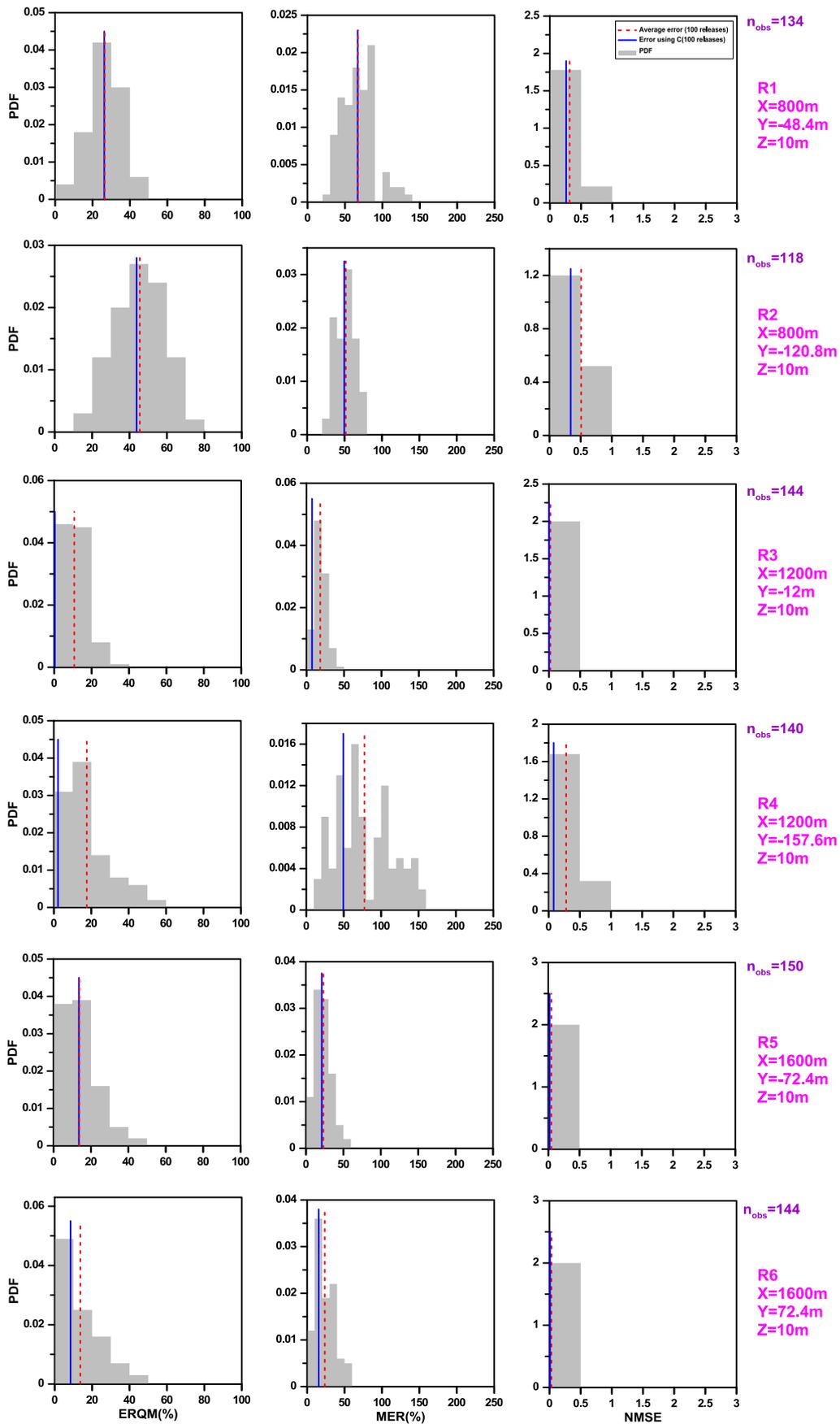


Figure IV.13 : Evolution des PDF des erreurs relatives de la quantité de masse totale, des erreurs relatives maximales, et des NMSE pour la configuration de quartier B45.

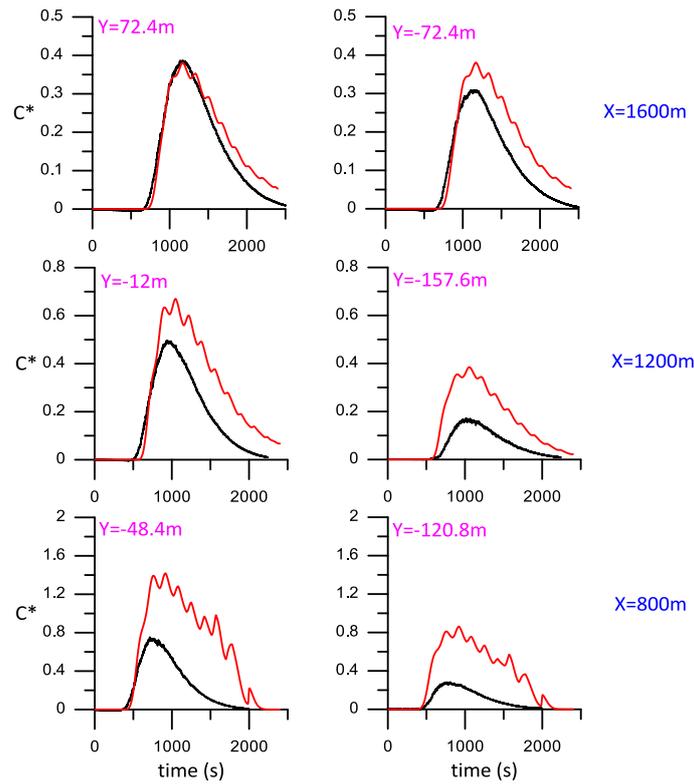


Figure IV.14 : Configuration B45 :  $\theta=45^\circ$  et  $z=H/2$ . Evolution temporelle de concentration adimensionnée  $C^*=C\delta^3/M$  à différentes positions en aval de la source. Comparaison des mesures en soufflerie (en noir) et du modèle SIRANERISK (en rouge).

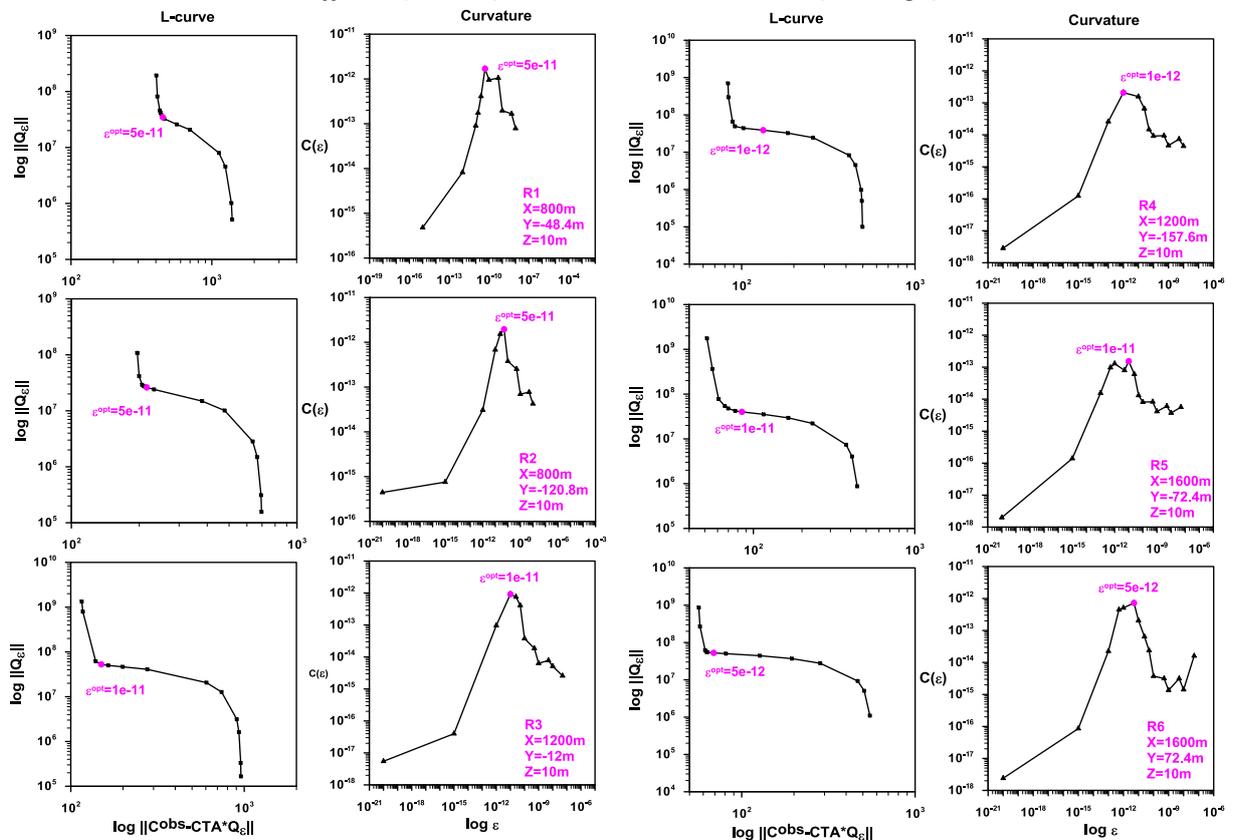


Figure IV.15 : Evolution des différentes courbes de L-curve et de courbure pour les différents points récepteurs utilisés dans l'inversion pour la configuration B45.

#### IV.1.4. Choix du paramètre de régularisation

Le choix des paramètres de régularisation de la méthode de Tikhonov a fait l'objet de plusieurs études scientifiques pendant les dernières décennies (Calvetti et al., 2004, 2000; Chamorro-Servent et al., 2011; Engl et Grever, 1994; Hanke, 1996; Hansen et O'Leary, 1993; Hansen, 2000b; Kathirgamanathan et al., 2003; Krawczyk-Stańdo et Rudnicki, 2008; Krawczyk-Stando et Rudnicki, 2007; Zhu et al., 2011b). Ces méthodes ont été partagées principalement en deux groupes : méthodes a posteriori et méthodes heuristiques (Bouman, 1998). Les méthodes a posteriori nécessitent des connaissances a priori, comme celle de « Discrepancy principale » (Morozov, 1966; Scherzer, 1993) ou celles qui se basent sur le choix de la meilleure solution minimisant l'erreur entre les valeurs réelles et les estimations. Les méthodes heuristiques correspondent à des techniques capables de prédire les paramètres de régularisation sans avoir recours à des informations a priori comme l'approche de « Generalized Cross-Validation (GCV) » (Wahba, 1990) ou de « L-curve » (Hansen, 1992) qui ont montré une grande fiabilité dans leurs résultats (Hansen, 2000b; Kathirgamanathan et al., 2003). Ces approches d'estimation peuvent être liées directement à la méthode de L-curve proposée par Hansen (1992) dont l'objectif est de trouver numériquement les valeurs des paramètres de régularisation qui correspondent au « coude » de cette courbe (Calvetti et al., 2004, 2000, 1999; Castellanos et al., 2002; Reichel et Sadok, 2008). Elles peuvent être également de nouvelles approches totalement indépendantes de la méthode L-curve (Krawczyk-Stando and Rudnicki, 2007; Wu, 2003). Par exemple, Calvetti et al. (2004; 2000) ont proposé une nouvelle méthode itérative qui permet d'estimer le paramètre de régularisation en couplant la théorie de L-curve avec l'approche de bidiagonalisation de « Lanczos » en ajustant leurs méthodes de L-ribbon décrites précédemment dans Calvetti et al. (1999). Ainsi, Castellanos et al. (2002) ont développé une autre approche numérique itérative nommée « méthode de triangles » pour déterminer le « coude » de la courbe L-curve. Par ailleurs, Krawczyk-Stando et Rudnicki (2007) et Wu (2003) ont développé une nouvelle approche dite U-curve pour choisir les paramètres de régularisation de la méthode Tikhonov. Comme cela a été fait pour les autres techniques qui sont validées et comparées dans plusieurs domaines d'ingénierie, Chamorro-Servent et al. (2011) ont testé la fiabilité de cette approche U-curve sur des expériences réelles de tomographie optique et ont montré que cette technique automatique de sélection des paramètres de régularisation est assez sophistiquée et consistante pour la reconstruction des images.

Dans ce paragraphe, nous présentons des tests de fiabilité de quatre méthodes différentes de sélection des paramètres de régularisation sur la qualité des résultats d'inversion de débit d'une source de pollution atmosphérique avec l'approche de Tikhonov. Cette analyse a été effectuée pour un seul scénario en choisissant comme récepteur de référence celui qui est situé aux coordonnées ( $X=800\text{m}$ ,  $Y=0\text{m}$ ) à une altitude de  $Z=10\text{m}$ . L'objectif était de choisir la technique la plus adaptée pour notre application et non de valider ces approches qui sont bien étudiées par ailleurs dans les travaux cités ci-dessus. Le choix s'est fait par une analyse statistique avancée sur les 100 réalisations effectuées en soufflerie et sur la moyenne d'ensemble pour chaque valeur du paramètre de régularisation  $\varepsilon$ . Ainsi, nous calculons pour tous les  $\varepsilon$  estimés des paramètres statistiques pour évaluer et comparer les résultats de l'inversion des différentes approches avec les valeurs réelles.

### IV.1.4.1. Présentation des méthodes à tester

Nous rappelons tout d'abord que la mise en place de la méthode de Tikhonov consiste à minimiser la fonction coût :

$$J_{RT} = \left\| C^{obs} - CTA \times Q \right\|_{\mathbb{R}^{n_c}}^2 + \varepsilon^2 \left\| Q \right\|_{\mathbb{R}^{n_c}}^2 \quad (IV.1-5)$$

où  $C^{obs}$  est le vecteur de données d'observation,  $CTA$  est la matrice fournie par le modèle direct,  $Q$  est le vecteur de débit d'émission à estimer et  $\varepsilon$  est le paramètre de régularisation. Nous rapellons que divers études scientifiques (Bocquet, 2012; Davoine et Bocquet, 2007; Krysta et al., 2008; Winiarek et al., 2014, 2012) ont fait recours à des méthodes de sélection d'hyperparamètres en modélisation inverse de la dispersion atmosphérique. Les quatre techniques à tester pour estimer le paramètre de régularisation sont respectivement la méthode de L-curve, la méthode d'U-curve, la méthode de f-slope et la méthode analytique de la détermination de la courbure maximale de la courbe L-curve. Nous choisissons dans ce paragraphe la méthode de L-curve comme référence et nous la comparons aux autres approches.

- Méthode de L-curve

Cette méthode très utilisée permet de déterminer le paramètre de régularisation à partir de la courbe de L-curve (Figure IV.16-a) qui exprime en échelle logarithmique l'évolution de l'erreur due à la régularisation  $\|Q_\varepsilon\|$  en fonction de l'erreur de bruitage  $\|C^{obs} - CTA \times Q_\varepsilon\|$ . Comme montré dans le paragraphe (III.2.2.3.4), l'erreur de régularisation dans la partie verticale de la courbe est fortement sensible aux variations de  $\varepsilon$ . Mais pour certaines valeurs de  $\varepsilon$  et précisément dans la partie horizontale de cette courbe, l'erreur de bruitage devient plus sensible au paramètre de régularisation. Hansen et O'Leary (1993) et Hansen (2000; 1992) ont montré que le sommet de l'angle concave qui sépare ces deux parties de la courbe correspond au point de courbure maximale. La valeur optimale de  $\varepsilon$ , correspondant à ce point de la courbe L-curve, reflète un bon équilibre entre les effets des erreurs de régularisation et celles dues au bruitage des signaux d'observation et correspond souvent au paramètre  $\varepsilon$  pour lequel les normes de solution  $\|Q_\varepsilon\|$  sont les plus petites pour les résidus  $\|C^{obs} - CTA \times Q_\varepsilon\|$  les plus faibles. Elle peut être déterminée en traçant la droite de pente -1 tangente à la courbe (traits interrompus vert de la Figure IV.16-a).

- Méthode d'U-curve

La méthode de U-curve a été développée par Krawczyk-Stańdo et Rudnicki (2008) et Krawczyk-Stańdo et Rudnicki (2007). Il s'agit d'une méthode similaire à celle de L-curve dont le principe est de tracer cette fois la somme de l'inverse de la norme de solution et de la norme de résidus pour toutes les valeurs de  $\varepsilon$  positives :

$$U(\varepsilon) = \frac{1}{\|C^{obs} - CTA \times Q_\varepsilon\|} + \frac{1}{\|Q_\varepsilon\|} \quad (IV.1-6)$$

L'allure typique de cette courbe de  $U(\varepsilon)$  (Figure IV.16-b) se décompose en trois parties dont deux tronçons verticaux (ou quasi-verticaux) aux extrémités droite et gauche, et une partie dans le milieu presque horizontale. Cette évolution peut être interprétée de la même manière que la L-curve. En effet, les deux parties verticales (1 et 3 de la Figure IV.16-b) s'expliquent par la domination de l'un des deux termes de l'équation (IV.1-5) sur l'autre et la partie centrale horizontale représente un équilibre entre les effets de régularisation et de bruitage. Récemment, la méthode U-curve a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche (Chamorro-Servent et al., 2011; Krawczyk-Stańdo et

Rudnicki, 2008; Krawczyk-Stando et Rudnicki, 2007; Yuan et al., 2010). Par exemple, Krawczyk-Stando et Rudnicki (2007) ont montré que les résultats de cette méthode sont assez comparables à ceux de la méthode L-curve. De même, d'autres travaux de validation et de comparaison montrent que l'utilisation de cette méthode permet de minimiser énormément le temps de calcul parce qu'elle réduit la fenêtre de recherche du paramètre  $\varepsilon$  (seulement pour la partie 2, horizontale et bornée, de la Figure IV.16-b). Ainsi, Chamorro-Servent et al. (2011) ont montré que cette méthode U-curve permet de fournir des résultats plus fiables que ceux de la méthode L-curve dans certains cas.

- Méthode de f-slope

La méthode de « f-slope » (ou « flattest slope ») est présentée pour la première fois par Wu (2003). Elle repose sur l'étude de l'évolution de la norme de la solution en fonction de  $\ln(1/\varepsilon)$  (Figure IV.16-c). Le choix du paramètre de régularisation optimal sur cette courbe a été expliqué en détail dans Wu (1997). Il s'agit de la valeur de  $\varepsilon$  qui correspond au point qui sépare les parties verticale et horizontale de la courbe (point en rose dans la Figure IV.16-c). Dans le cas où il y a deux parties plates sur la courbe de f-slope, nous traçons deux courbes différentes en changeant le bruitage au niveau des observations et nous choisissons donc la partie horizontale la plus stable (moins écartée) entre les deux courbes. Dans les mêmes travaux de recherche cités ci-dessus, cette méthode a été évaluée et comparée à celle de L-curve. Les résultats de ces travaux montrent que cette méthode f-slope fournit de bonnes estimations des paramètres de régularisation qui permettent d'avoir des prédictions meilleures que celles de la méthode classique L-curve. En effet, la méthode f-slope peut converger dans des situations où la méthode L-curve ne converge pas et plus précisément dans les cas décrits par Vogel (1997).

- Méthode analytique de la courbure maximale de la L-curve

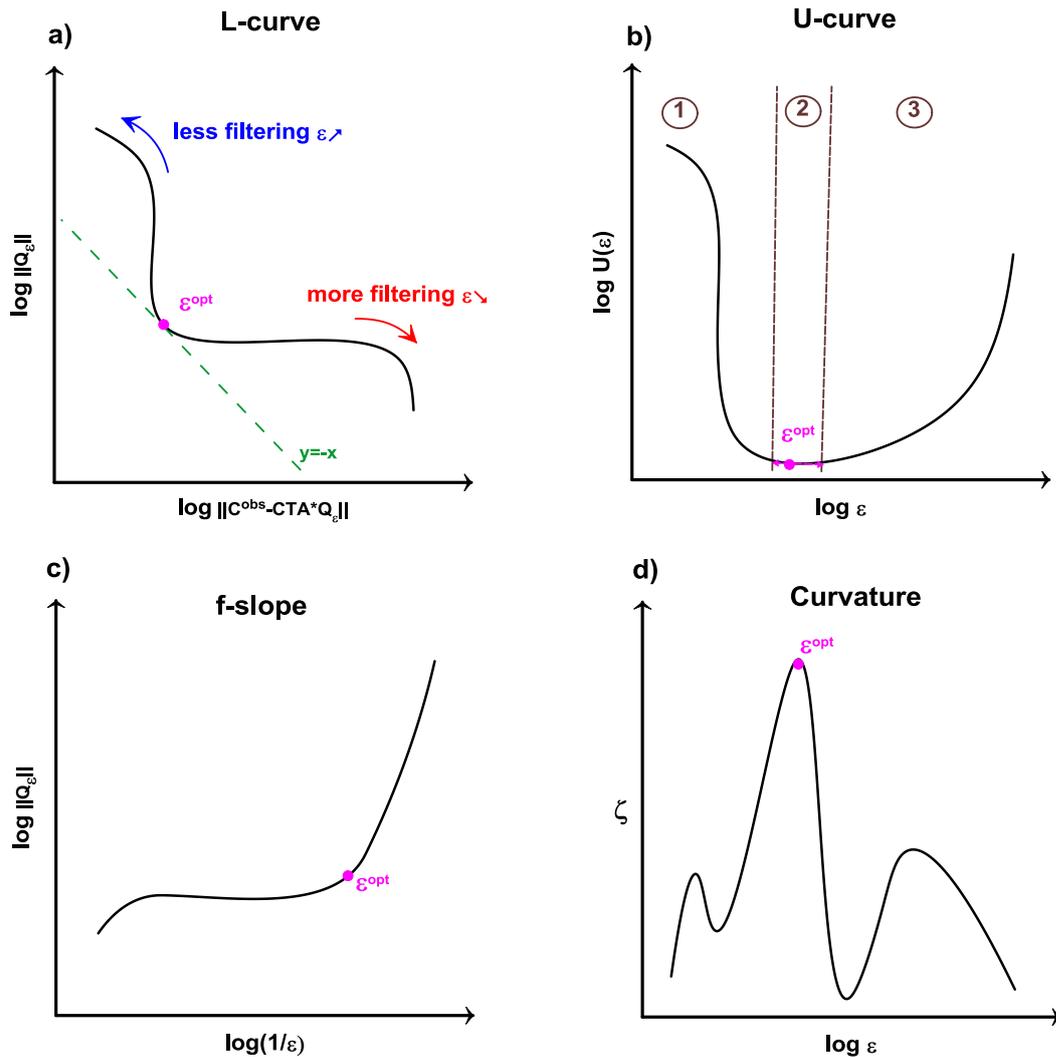
Cette méthode permet de déterminer les meilleurs paramètres de régularisation en cherchant analytiquement le point de courbure maximale de la L-curve (point rose sur la Figure IV.16-d). Il s'agit de chercher mathématiquement le maximum de la fonction de courbure relative à la courbe L-curve (Figure IV.8 -d):

$$\zeta = \frac{\left| \frac{dy}{d\varepsilon} \frac{d^2x}{d\varepsilon^2} - \frac{dx}{d\varepsilon} \frac{d^2y}{d\varepsilon^2} \right|}{\left( \left( \frac{dy}{d\varepsilon} \right)^2 + \left( \frac{dx}{d\varepsilon} \right)^2 \right)^{3/2}} \quad (\text{IV.1-7})$$

où  $x = \log(x) = \log(\|C^{obs} - CTA \times Q_\varepsilon\|)$  et  $y = \log(y) = \log(\|Q_\varepsilon\|)$  varient en fonction de  $\varepsilon$ .

Après avoir remplacé  $x$  et  $y$  par ses valeurs et développé l'équation (IV.1-7) nous cherchons directement les maximums de l'équation :

$$\zeta = \frac{xy \left[ y \frac{dy}{d\varepsilon} \left( x \frac{d^2x}{d\varepsilon^2} - \left( \frac{dx}{d\varepsilon} \right)^2 \right) - x \frac{dx}{d\varepsilon} \left( y \frac{d^2y}{d\varepsilon^2} - \left( \frac{dy}{d\varepsilon} \right)^2 \right) \right]}{\left[ x^2 \left( \frac{dy}{d\varepsilon} \right)^2 - y^2 \left( \frac{dx}{d\varepsilon} \right)^2 \right]^{3/2}} \quad (\text{IV.1-8})$$



Figure

IV.16 : Courbes typiques des différentes méthodes de choix de paramètres de régularisation : courbe de la méthode L-curve inspirée de (Hansen, 1998) (a), courbe de la méthode U-curve (b), courbe de la méthode f-slope (c) et méthode analytique d'évolution de la courbure (d).

#### IV.1.4.2. Choix de la méthode

Dans une première étape, nous utilisons seulement le signal moyen de concentration (moyenne d'ensemble) pour reconstruire le débit d'émission de la source et estimer le paramètre de régularisation par les différentes méthodes présentées ci-dessus. La Figure IV.17 résume les résultats d'estimation de  $\varepsilon$  effectuée respectivement par la méthode L-curve (Figure IV.17-a), la méthode U-curve (Figure IV.17-b), la méthode f-slope (Figure IV.17-c) et la méthode analytique (Figure IV.17-d). Nous observons que la gamme des valeurs optimales de  $\varepsilon$  estimée par la méthode U-curve est bornée entre  $10^{-7}$  et  $10^{-5}$ . Ces valeurs appartiennent clairement à la partie de la courbe L-curve où la solution est largement dominée par les erreurs de régularisation (ou de filtrage). Néanmoins, les autres approches testées fournissent des valeurs optimales assez proches et de même ordre de grandeur. La Figure IV.18 illustre l'impact de l'utilisation de ces différents paramètres sur la qualité des résultats d'inversion. Nous remarquons tout d'abord, que les formes des signaux inversés (présentés en rouge) ne sont pas assez similaires bien que les erreurs relatives maximales (*MER*) et les erreurs relatives sur la masse totale (*ERQM*) soient quasi-identiques en utilisant les  $\varepsilon$  trouvés par les méthodes L-curve, f-slope et par la méthode analytique de courbure maximale. Par ailleurs,

l'inversion de débit d'émission par la méthode de Tikhonov, en utilisant le paramètre  $\varepsilon$  estimé par l'approche U-curve, fournit des erreurs assez élevées. En effet, l'erreur quadratique moyenne normalisée (NMSE) est dans ce cas assez élevée et dépasse largement la gamme des valeurs acceptables définies par Chang et Hanna (2004). Les résultats de reconstruction des débits d'émission sont globalement acceptables bien que les erreurs relatives maximales soient relativement élevées. A ce stade de l'analyse, nous ne pouvons pas choisir définitivement la meilleure méthode d'estimation parce que chaque méthode satisfait un seul critère parmi ceux calculés. En effet, les erreurs relatives maximales sont relativement faibles en utilisant la méthode analytique, l'erreur quadratique moyenne normalisée est plus faible en utilisant la méthode f-slope et l'erreur sur la quantité de masse plus faible en utilisant le paramètre de régularisation fourni par la méthode L-curve.

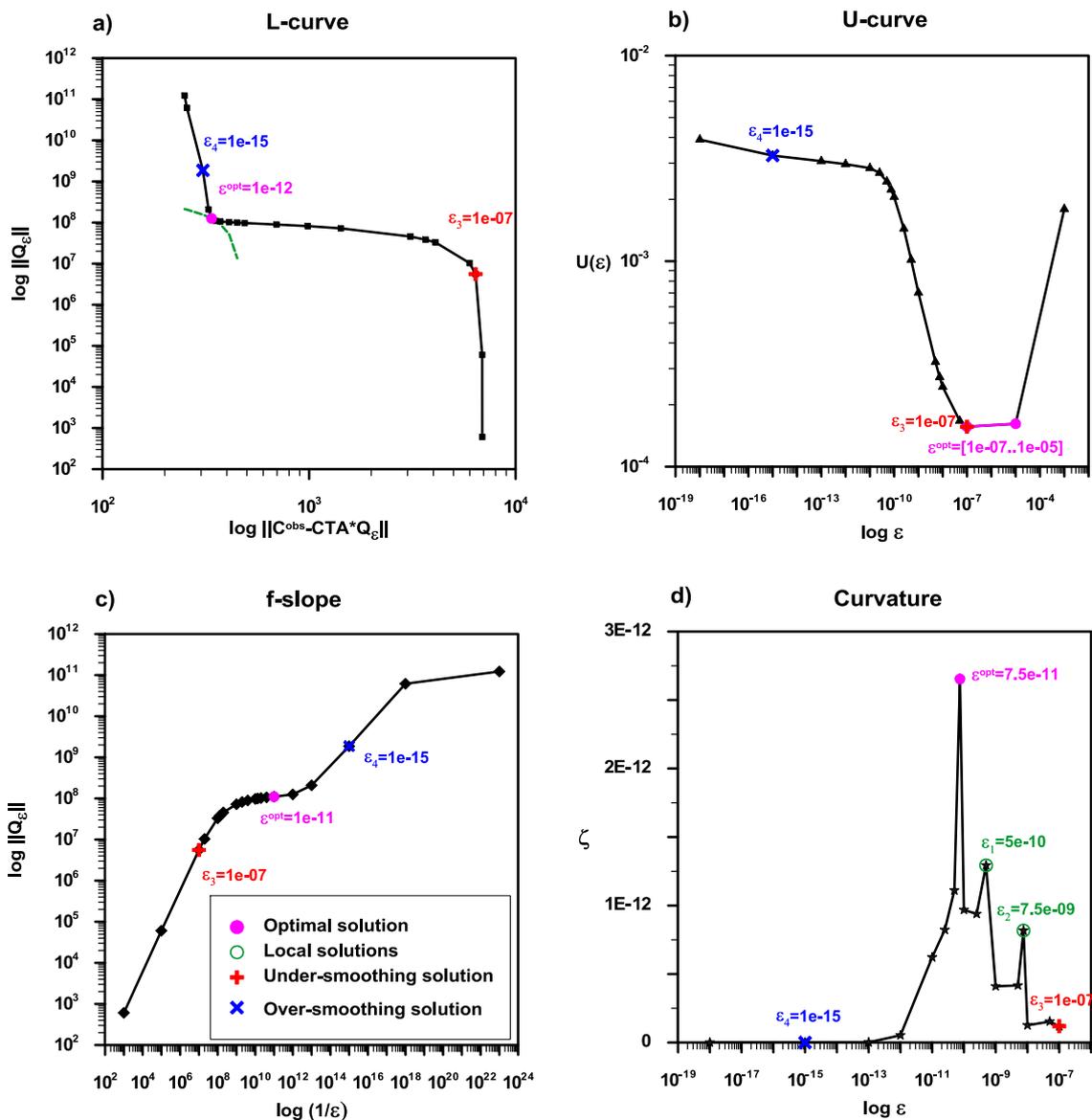


Figure IV.17 : Application des différentes méthodes pour estimer le paramètre de régularisation  $\varepsilon$  en utilisant la moyenne d'ensemble des mesures en  $X=800m$  comme observation. En noir l'évolution de la courbe caractéristique de la méthode L-curve (a), U-curve (b), f-slope(c) et de la courbure (d).

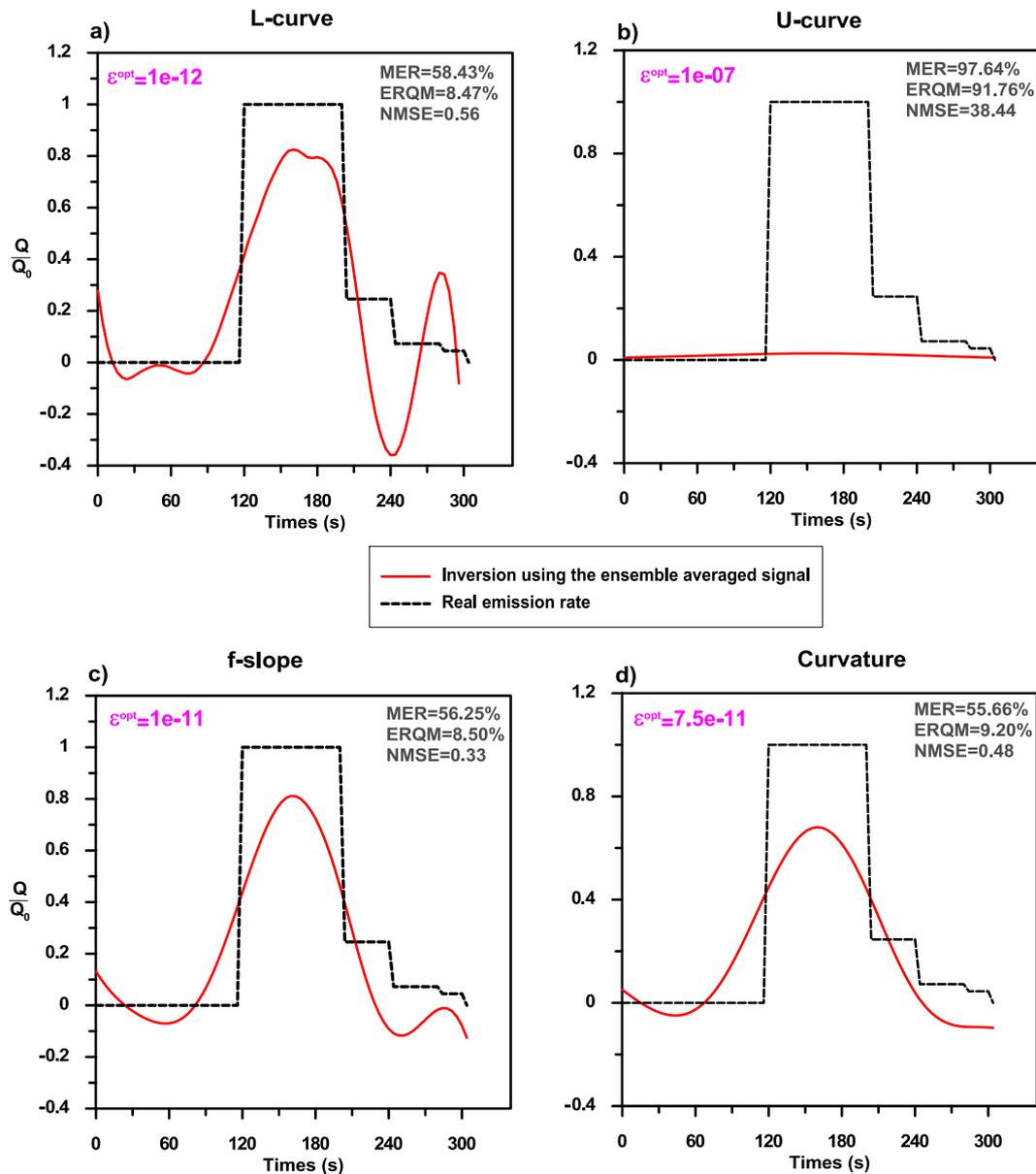


Figure IV.18 : Comparaison entre le débit réel (en trait interrompu noir) et les signaux inversés (traits continus rouges) en utilisant les paramètres de régularisation déterminés par la méthode L-curve (a), la méthode U-curve (b), la méthode f-slope (c) et la méthode analytique (d).

Avant de passer à l'étape suivante, nous présentons sur la Figure IV.19 les résultats de l'inversion en utilisant deux paramètres de régularisation qui correspondent aux maximums locaux de la courbe de courbure (Figure IV.19-a et Figure IV.19-b) et les résultats obtenus en utilisant deux paramètres de régularisation appartenant respectivement à la partie de la courbe L-curve où les solutions sont dominées par les erreurs de régularisation (Figure IV.20-a) ou par les erreurs de bruitage (Figure IV.20-b). Cela met en évidence la sensibilité de la qualité de la recherche de débit aux variations des valeurs de  $\epsilon$  (paramètre de régularisation) et montre bien les enjeux scientifiques de cette démarche de comparaison pour évaluer plusieurs méthodes d'estimation des paramètres de régularisation. La Figure IV.17-d montre que la courbe de courbure maximale admet d'autres maximums locaux. Dans ce cas, le choix de l'algorithme numérique d'optimisation est assez important pour retrouver le maximum global parce que l'utilisation de l'un de ces maximums locaux peut aboutir à des erreurs d'inversion assez élevées par rapport à l'utilisation de la valeur optimale

globale. En effet, comme le montrent les Figures IV.19-a et IV.19-b, le  $NMSE$  et l' $ERQM$  sont plus de 5 fois plus élevés en les utilisant. D'autre part, nous observons sur la Figure IV.20-b que la qualité des résultats d'estimation de la quantité de masse totale du polluant rejetée dans l'atmosphère est assez acceptable et ne dépasse pas 10%, bien que les fluctuations du signal soient assez importantes. Cette solution est proche de celle fournie par la méthode des moindres carrés classique, dont l'erreur est assez faible mais pour laquelle la norme euclidienne de la solution est assez importante.

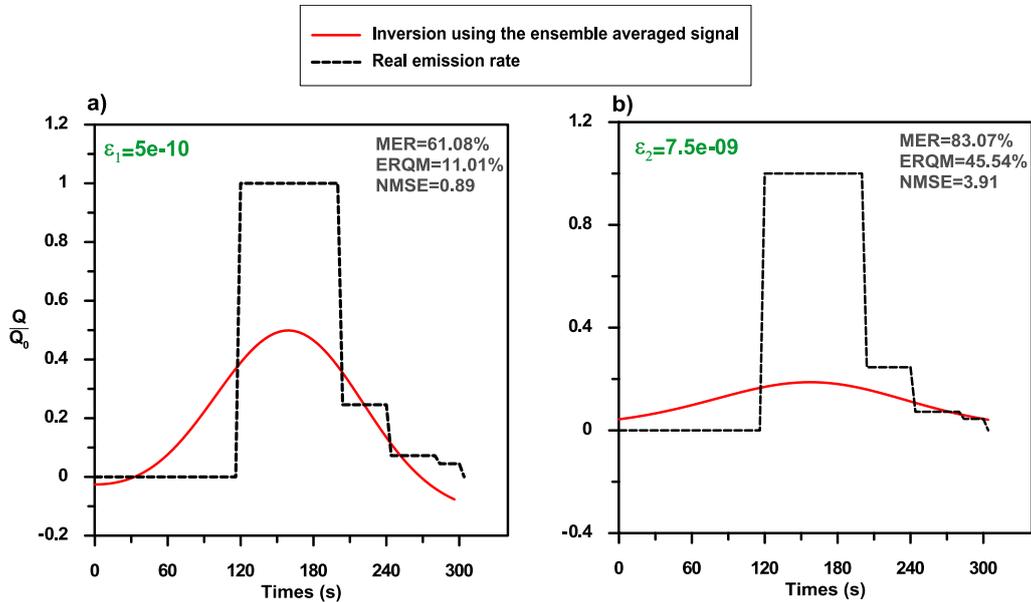


Figure IV.19 : Comparaison entre le débit réel (en trait interrompu noir) et les signaux inversés (traits continus rouge) en utilisant les deux paramètres de régularisation correspondant aux maximums locaux de la courbe de courbature

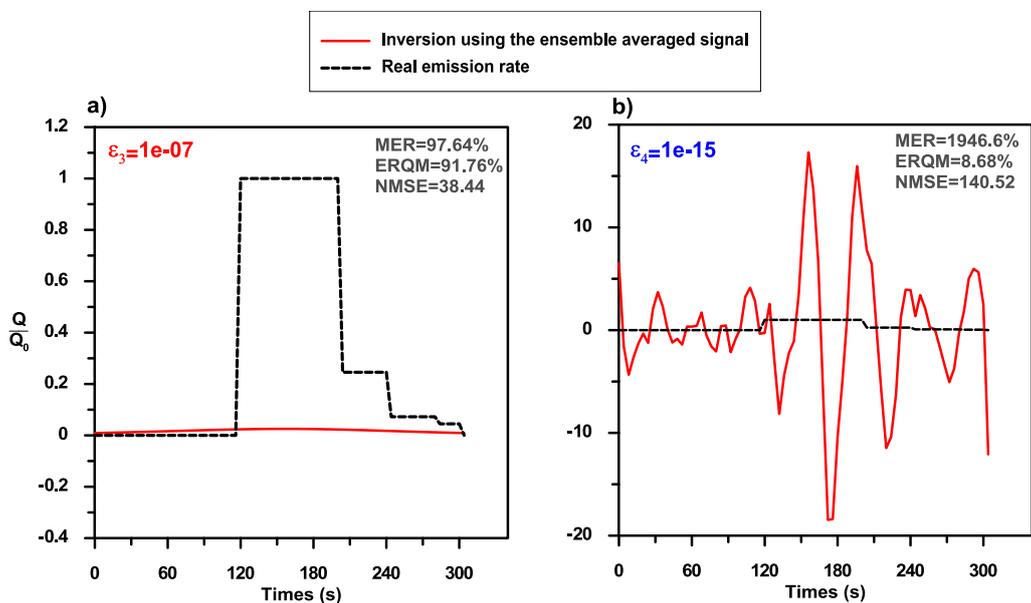


Figure IV.20 : Comparaison entre le débit réel (en trait interrompu noir) et les signaux inversés (traits continus rouge) en utilisant les deux paramètres de régularisation appartenant respectivement à la partie de la courbe de L-curve où les solutions sont dominées par les erreurs de régularisation (a) et les erreurs de bruitage (b)

Pour avoir une vision plus générale (ou détaillée) sur la qualité des résultats, nous présentons sur la Figure IV.21 l'évolution de quatre critères différents par rapport à la variation du paramètre de régularisation sur une large gamme de valeur (allant de  $10^{-14}$  à  $10^{-5}$ ). Les Figures IV.21-a, IV.21-b, IV.21-c et IV.21-d illustrent respectivement les meilleures valeurs de  $\varepsilon$  qui minimisent respectivement l'erreur relative maximale *MER* (Figure IV.21-a), l'erreur sur la quantité de masse totale *ERQM* (Figure IV.21-b), le *NMSE* (Figure IV.21-c) et l'erreur quadratique normalisée par l'écart type du débit réel (Figure IV.21-d). Ces Figures prouvent qu'il n'y a pas une valeur unique de  $\varepsilon$  qui permette d'optimiser tous les critères à la fois. Cela peut s'expliquer par les résultats présentés ci-dessus qui montrent qu'il n'y a pas une méthode d'estimation de  $\varepsilon$  qui est apte à satisfaire tous les critères d'évaluation (globale et locale) en même temps. C'est une raison de plus qui nous encourage à avancer plus en avant dans notre étude de sensibilité en proposant deux autres critères hybrides d'évaluation qui englobent à la fois les erreurs systématiques et les erreurs locales.

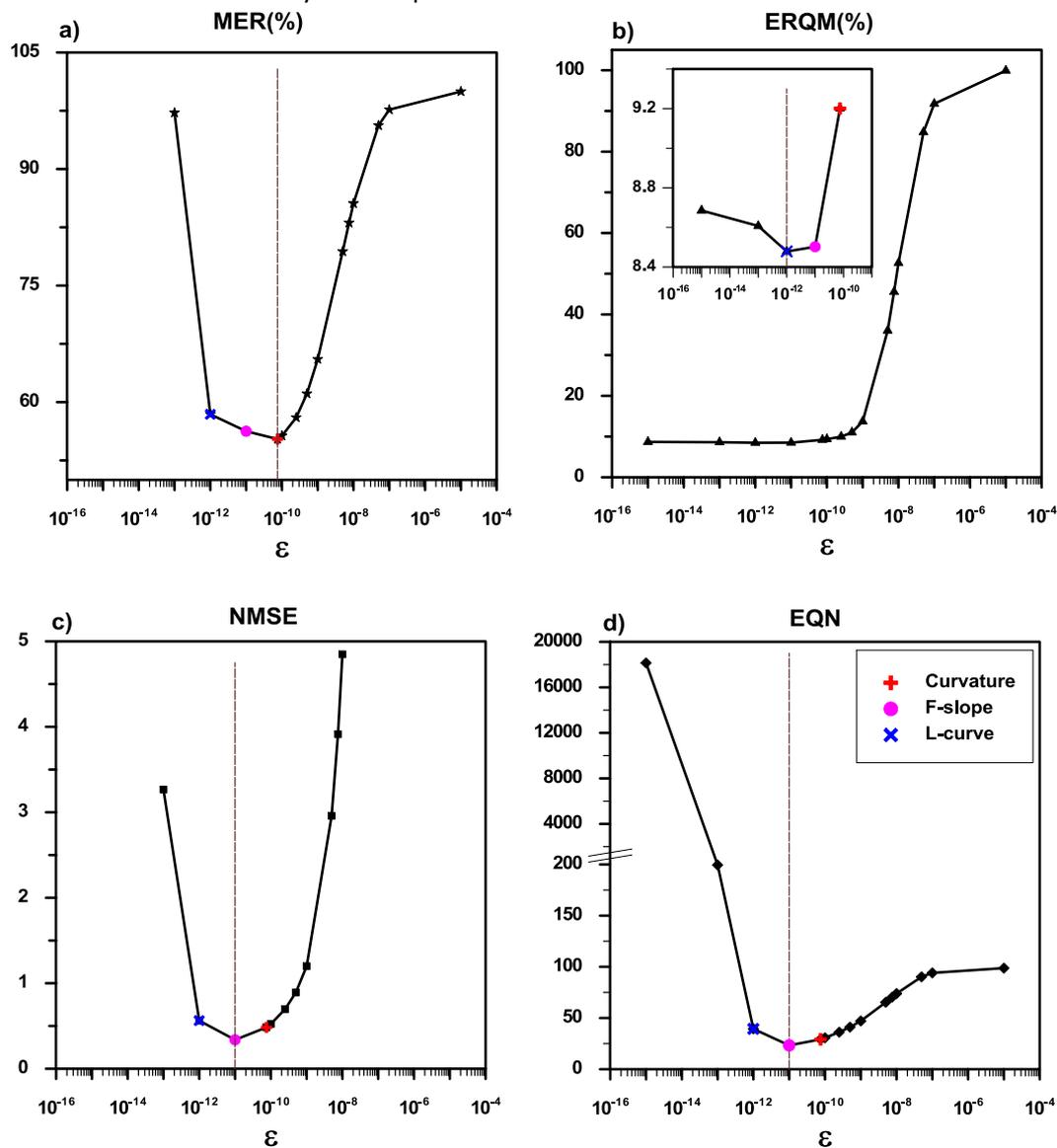


Figure IV.21 : Evolutions de l'erreur relative maximale *MER* (a), de l'erreur sur la quantité de masse totale *ERQM* (b), de *NMSE* (c) et de la distance euclidienne entre les débits réel et estimé, normalisés par l'écart type du débit réel (d) en fonction de la variation des paramètres de régularisation  $\varepsilon$ .

Il s'agit ici, de minimiser la distance euclidienne entre leurs valeurs optimales et les valeurs trouvées précédemment :

$$CR1 = \left\| \begin{matrix} ERQM & 0 \\ MER & -0 \\ EQN & 0 \end{matrix} \right\| = \sqrt{ERQM^2 + MER^2 + EQN^2} \quad (IV.1-9)$$

$$CR2 = \left\| \begin{matrix} ERQM & 0 \\ MER & -0 \\ NMSE & 0 \end{matrix} \right\| = \sqrt{ERQM^2 + MER^2 + NMSE^2} \quad (IV.1-10)$$

Nous aurons des résultats idéaux dans la reconstruction des débits lorsque ces deux critères s'annuleront. On remarque sur la Figure IV.22, qui illustre la variation de ces deux critères hybrides en fonction de  $\varepsilon$ , que la méthode la plus fiable dans les deux cas est la méthode de f-slope. La crédibilité de cette méthode en terme de  $NMSE$  et  $EQN$  est donc plus grande et apporte plus de fiabilité par rapport à la réalité que celle des autres approches. Nous retrouvons ainsi les mêmes résultats que sur la Figure IV.21-c et sur la Figure IV.21-d.

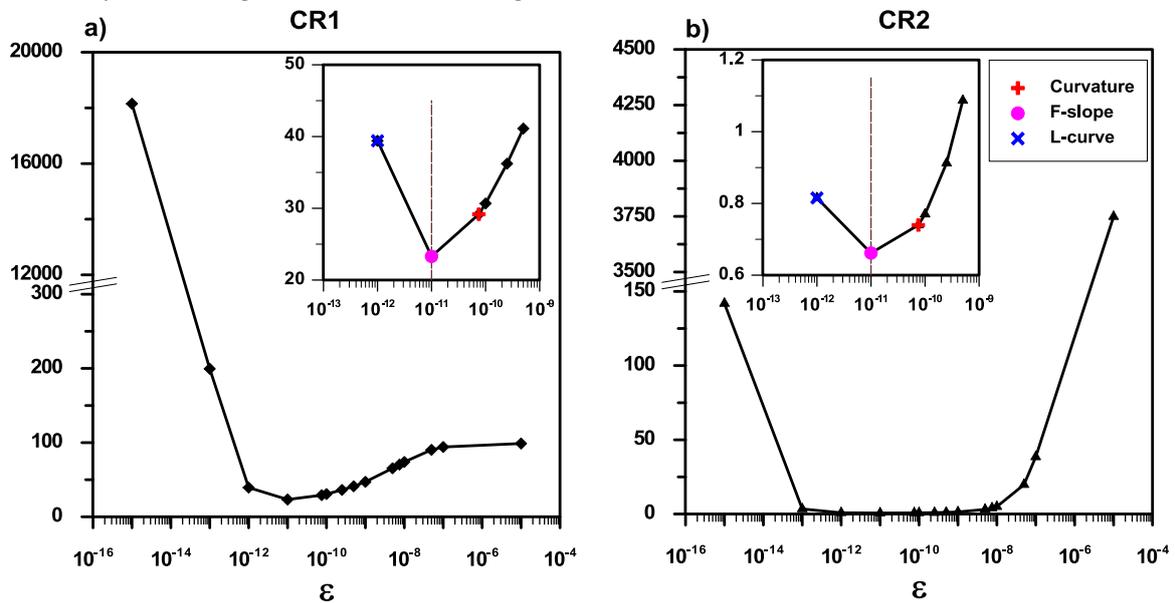


Figure IV.22 : Evolution des critères hybrides CR1 (a) et CR2 (b) en fonction de la variation de  $\varepsilon$ . Les symboles en rose, en rouge et en bleu correspondent aux valeurs optimales des paramètres de régularisation fournis respectivement par les méthodes f-slope, analytique et de L-curve.

Après avoir testé la fiabilité de chaque méthode d'estimation de  $\varepsilon$  sur la qualité des résultats de l'inversion en utilisant la moyenne d'ensemble de la concentration présentée dans la Figure IV.4-a, nous étudions maintenant l'impact de l'utilisation de ces différentes approches sur la performance de notre algorithme inverse pour reproduire les émissions de la source en utilisant à chaque fois un signal instantané de concentration à la place de la moyenne d'ensemble. Ensuite, nous effectuons des statistiques sur la totalité des résultats d'inversion obtenus (100 débits inversés à partir des signaux instantanés de chaque réalisation) en calculant le  $NMSE$ , la fraction dans un facteur de 2 ( $FAC2$ ) et le biais fractionnel absolu ( $AFB$ ). La Figure IV.23 illustre la variabilité de ces paramètres statistiques par rapport à la méthode de régularisation. La projection des valeurs obtenues de  $\varepsilon$  par les approches citées ci-dessus sur les courbes de la Figure IV.23 montre que la méthode analytique de maximisation de la courbure est la plus fiable si on s'intéresse à reproduire la forme de l'évolution

du débit d'émission à partir des signaux instantanés. Malheureusement, le *NMSE* et le *AFB* sont légèrement plus élevés par rapport à leurs valeurs seuils définies par Chang et Hanna (2004).

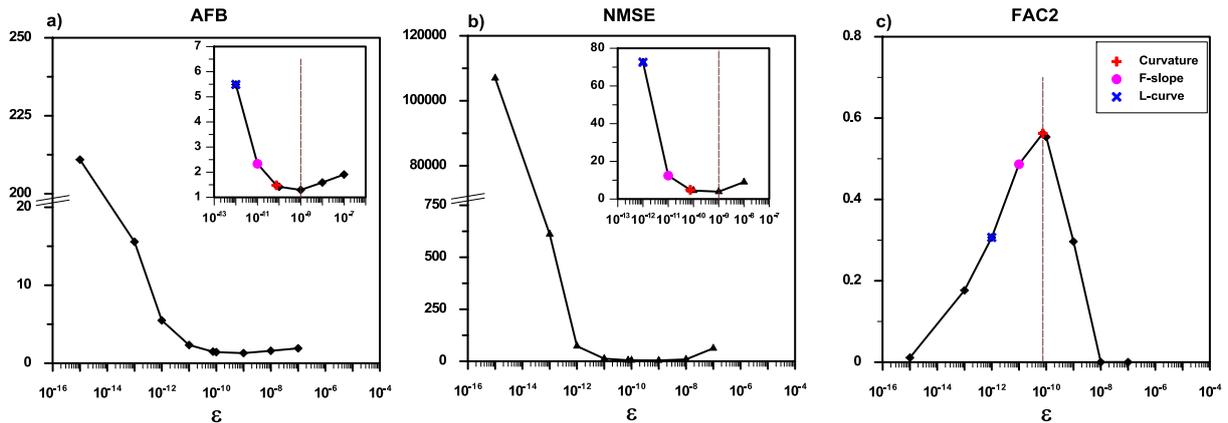


Figure IV.23 : Evolution du biais fractionnel absolu (a), de la NMSE (b) et de la fraction dans un facteur de 2 (c) en fonction de  $\varepsilon$ . Les symboles en rose, en rouge et en bleu correspondent aux valeurs optimales des paramètres de régularisation fournis respectivement par les méthodes f-slope, analytique et de L-curve.

Pour analyser qualitativement la qualité de l'inversion en utilisant les différentes valeurs optimales de  $\varepsilon$ , nous traçons sur la Figure IV.24 les marges d'erreurs que l'on peut avoir suite à l'utilisation des signaux instantanés de concentration. Nous remarquons que contrairement au cas précédent, les gammes d'erreurs sont cette fois assez similaires entre la méthode de L-curve et la méthode de U-curve. Cela est mis en évidence par les résultats de certains travaux de recherche cités ci-dessus. Par exemple, Chamorro-Servent et al. (2011) ont montré qu'on peut obtenir des résultats moins pertinents avec la méthode L-curve qu'avec la méthode U-curve qui ne fournit souvent qu'un intervalle des solutions possibles de  $\varepsilon$ . D'autre part, nous observons que la qualité de l'inversion avec la moyenne d'ensemble est assez similaire à la moyenne de tous les signaux inversés par les signaux instantanés. Cette étude de sensibilité s'achève donc par le choix de la méthode de maximisation de la courbure de la courbe L-curve. En effet, cette méthode permet d'avoir des résultats plus réalistes qualitativement (forte probabilité d'avoir des débits ne contenant que des valeurs positives) (Figure IV.24-d). Ainsi, nous avons montré sur la Figure IV.23 que cette approche permet de reconstruire les débits d'émission d'une source de pollution d'une manière plus correcte en fournissant des erreurs locales et globales plus faibles que les autres méthodes en utilisant les signaux de concentration instantanés. Nous envisageons dans des travaux ultérieurs de reprendre les simulations d'inversion en utilisant cette méthode d'estimation du paramètre de régularisation (maximum de courbure), ce qui n'a pas pu être réalisé dans ce travail par manque de temps. On peut s'attendre à des améliorations des résultats de l'inversion par rapport à ceux qui sont présentés dans la première partie de ce chapitre où nous avons utilisé la méthode de L-curve.

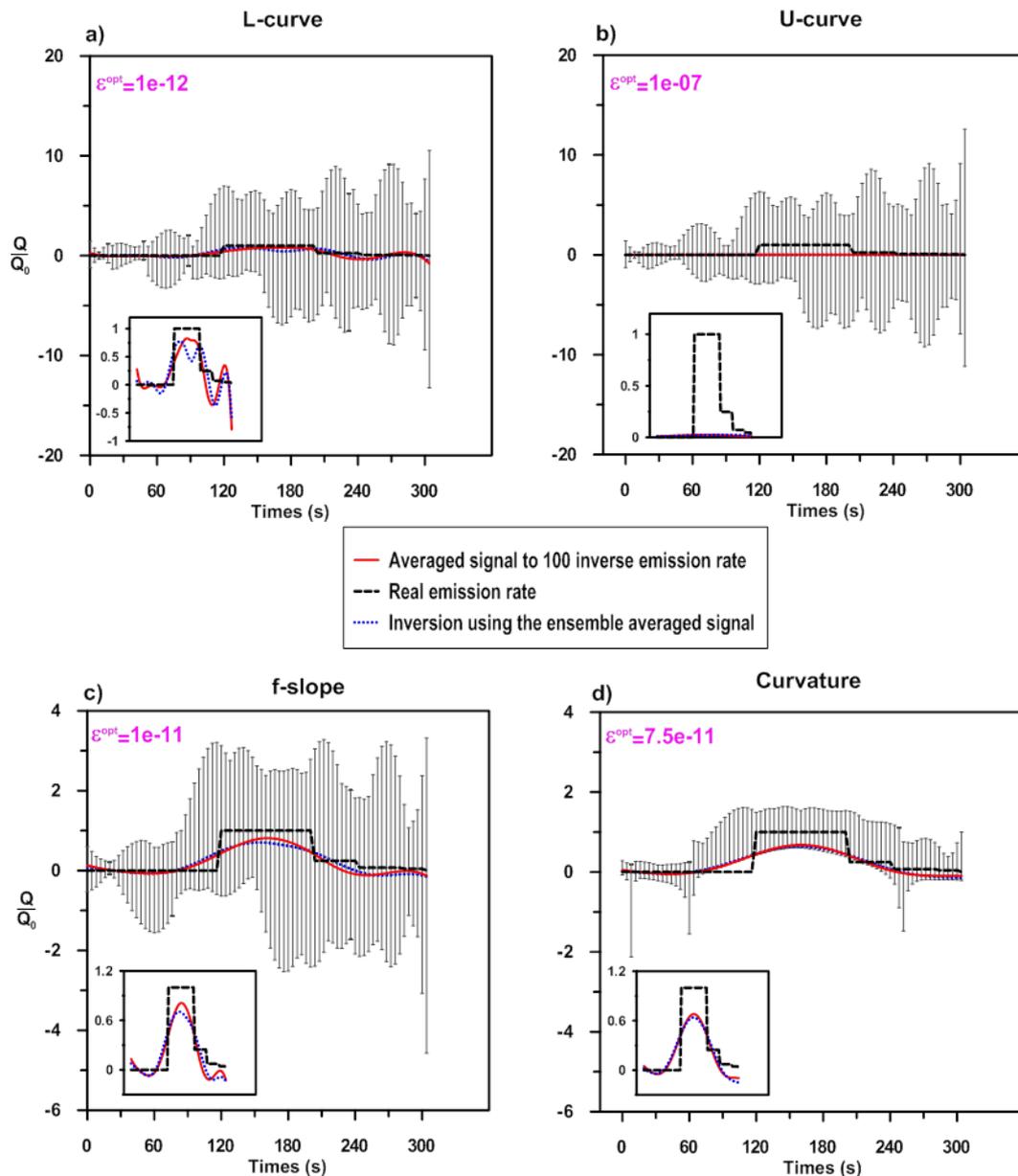


Figure IV.24 : Marges d'erreur d'inversion par rapport au débit réel (trait noire interrompu) à chaque instant de recherche en utilisant les signaux de concentration instantanés. Résultats obtenus pour chaque paramètre de régularisation en utilisant les méthodes de L-curve (a), de U-curve (b), de f-slope (c) et la méthode analytique de maximisation de courbures (d).

#### IV.1.5. Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté un certain nombre de résultats concernant la modélisation inverse d'un débit instantané d'une source de pollution connue. L'objectif était d'évaluer la capacité de l'algorithme inverse développé dans le cadre de ces travaux, à reconstruire les émissions à partir de signaux instantanés de concentration mesurés en soufflerie dans la configuration d'une couche limite atmosphérique ou dans un quartier idéalisé. L'utilisation des signaux instantanés dans l'inversion a été traitée par la méthode de Tikhonov, qui nécessite une bonne estimation de son paramètre de régularisation. Dans ce cadre, nous avons effectué une étude de sensibilité dans laquelle nous comparons la fiabilité de quatre méthodes différentes d'estimation de  $\varepsilon$ . Bien que la méthode de U-curve n'a pas permis de retrouver la bonne valeur de  $\varepsilon$  dans le cas

d'étude ci-dessus, nous sommes tout à fait conscients que cette approche a été bien validée et qu'elle fonctionne bien sur d'autres cas (même mieux que la méthode de L-curve), comme cela est présenté par Chamorro-Servent et al. (2011).

Les résultats de la modélisation inverse présentés dans ce chapitre sont globalement satisfaisants voire assez encourageants en termes de reproduction de la quantité de masse totale rejetée dans l'atmosphère, qui est une information assez importante pour gérer les situations de crise. Dans les situations de crise (accidents, incendies, ...) et pour des rejets de très courte durée, la reproduction de la forme détaillée des signaux de débit n'est pas une préoccupation majeure. En effet, la fiabilité des résultats sur la quantité totale de polluants rejetée dans ces cas devient plus importante que de chercher l'évolution temporelle du débit.

Après avoir traité le cas de la recherche du débit d'une source de pollution à l'échelle locale, nous allons étudier dans le prochain chapitre la fiabilité de l'algorithme proposé pour la recherche de la position et du débit de la source sur des configurations urbaines en utilisant également des observations synthétiques et expérimentales.

### IV.1.6. Références

- Bocquet, M., 2012. Parameter-field estimation for atmospheric dispersion: application to the Chernobyl accident using 4D-Var. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 138, 664–681.
- Bouman, J., 1998. *Quality of regularization methods*. Delft University Press, Delft.
- Calvetti, D., Golub, G.H., Reichel, L., 1999. Estimation of the L-Curve via Lanczos Bidiagonalization. *BIT Numer. Math.* 39, 603–619.
- Calvetti, D., Morigi, S., Reichel, L., Sgallari, F., 2000. Tikhonov regularization and the L-curve for large discrete ill-posed problems. *J. Comput. Appl. Math.* 123, 423–446.
- Calvetti, D., Reichel, L., Shuibi, A., 2004. L-Curve and Curvature Bounds for Tikhonov Regularization. *Numer. Algorithms* 35, 301–314.
- Castellanos, J.L., Gómez, S., Guerra, V., 2002. The triangle method for finding the corner of the L-curve. *Appl. Numer. Math.* 43, 359–373.
- Chamorro-Servent, J., Aguirre, J., Ripoll, J., Vaquero, J.J., Desco, M., 2011. Feasibility of U-curve method to select the regularization parameter for fluorescence diffuse optical tomography in phantom and small animal studies. *Opt. Express* 19, 11490–11506.
- Chang, J., Hanna, S.R., 2004. Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys* 87, 167–196.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., 2009. Validation expérimentale en soufflerie du code de dispersion SIRANERISK – Dispersion dans un quartier idéalisé. CEA-DAM, Bruyères le Châtel. 68p.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., Méjean, P., Armand, P., Salizzoni, P., 2008. Determination of concentration fluctuations within an instantaneous puff through wind tunnel experiments, in: 12th Int. Conf. on Harmo. within Atmos. Disp. Modell. for Regul. Purposes, Cavtat Croatia.
- Cierco, F.-X., Soulhac, L., Méjean, P., Lamaison, G., Salizzoni, P., Armand, P., 2010. Validation of the SIRANERISK model against a wind tunnel experiment of dispersion of a short release in an idealized urban street network.
- Davoine, X., Bocquet, M., 2007. Inverse modelling-based reconstruction of the Chernobyl source term available for long-range transport. *Atmospheric Chem. Phys.* 7, 1549–1564.
- Engl, H.W., Grever, W., 1994. Using the L-curve for determining optimal regularization parameters.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2010. Experimental Study of Pollutant Dispersion Within a Network of Streets. *Bound.-Layer Meteorol.* 136, 457–487.
- Hanke, M., 1996. Limitations of the L-curve method in ill-posed problems. *BIT Numer. Math.* 36, 287–301.
- Hansen, P.C., 1992. Analysis of Discrete Ill-posed Problems by Means of the L-curve. *SIAM Rev* 34, 561–580.

- Hansen, P.C., 1998. Regularization Tools - A Matlab Package for Analysis and Solution of Discrete Ill-Posed Problems - Version 3.0 for Matlab 5.2. Numer Algorithms 6, 1–35.
- Hansen, P.C., 2000. The L-Curve and its Use in the Numerical Treatment of Inverse Problems, in: In Computational Inverse Problems in Electrocardiology, Ed. P. Johnston, Advances in Computational Bioengineering. WIT Press, pp. 119–142.
- Hansen, P.C., O’Leary, D.P., 1993. The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete Ill-Posed Problems. SIAM J. Sci. Comput. 14, 1487–1503.
- Kathirgamanathan, P., Mckibbin, R., Mclachlan, R.I., 2003. Source release rate estimation of atmospheric pollution from a non-steady point source – Part 2: Source at an unknown location. Res Lett Inf Math Sci Vol.5, 85–118.
- Krawczyk-Stańdo, D., Rudnicki, M., 2007. Regularization Parameter Selection in Discrete Ill-Posed Problems - The Use of the U-Curve. Appl. Math. Comput. Sci. 17, 157–164.
- Krawczyk-Stańdo, D., Rudnicki, M., 2008. The Use of L-Curve and U-Curve in Inverse Electromagnetic Modelling, in: Wiak, S., Krawczyk, A., Dolezel, I. (Eds.), Intelligent Computer Techniques in Applied Electromagnetics, Studies in Computational Intelligence. Springer Berlin Heidelberg, pp. 73–82.
- Krysta, M., Bocquet, M., Brandt, J., 2008. Probing ETEX-II data set with inverse modelling. Atmospheric Chem. Phys. 8, 3963–3971.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Armand, P., 2011a. Presentation of siranerisk-2.0 – A decision-support oriented computational tool adapted to the dispersion of deleterious rbc agent in the urban atmospheric environment – Examples of application.
- Lamaison, G., Soulhac, L., Cierco, F.-X., Salizzoni, P., Armand, P., 2011b. Validation of siranerisk-2.0 operational model against a lagrangian particle dispersion model and a new campaign of dispersion experiments performed in the Imfa-ecl wind tunnel in an idealized urban mock up, in: 14th Int. Conf. on Harmo. within Atmos. Disp. Modell. for Regul. Purposes, Kos, Grèce.
- Morozov, V.A., 1966. On the solution of functional equations by the method of regularization. Sov. Math Dokl 7, 414–417.
- Reichel, L., Sadok, H., 2008. A new L-curve for ill-posed problems. J Comput Appl Math 219, 493–508.
- Roussel, G., Ternisien, E., Benjelloun, M., 2002. Estimation d’un modèle stationnaire de dispersion et localisation de source. Application à la surveillance de la pollution. TS Trait. Signal 19, 37–48.
- Scherzer, O., 1993. The use of Morozov’s discrepancy principle for Tikhonov regularization for solving nonlinear ill-posed problems. Computing 51, 45–60.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. Atmos. Environ. 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2013. Parametric laws to model urban pollutant dispersion with a street network approach. Atmos. Environ. 67, 229–241.
- Tikhonov, A.N., Arsenin, V.Y., 1977. Solutions of Ill-posed Problems., Translation Edition. ed. Halsted Press Book, Washington, DC.
- Vogel, C.R., 1997. Non-Convergence of the L-Curve Regularization Parameter Selection Method, in: Inverse Problems. pp. 535–547.
- Wahba, G., 1990. Spline models for observational data. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, Pa.
- Winiarek, V., Bocquet, M., Duhanyan, N., Roustan, Y., Saunier, O., Mathieu, A., 2014. Estimation of the caesium-137 source term from the Fukushima Daiichi nuclear power plant using a consistent joint assimilation of air concentration and deposition observations. Atmos. Environ. 82, 268–279.
- Winiarek, V., Bocquet, M., Saunier, O., Mathieu, A., 2012. Estimation of errors in the inverse modeling of accidental release of atmospheric pollutant: Application to the reconstruction of the cesium-137 and iodine-131 source terms from the Fukushima Daiichi power plant. J. Geophys. Res. Atmospheres 117, n/a–n/a.
- Wu, L., 1997. Regularization Methods and Algorithms for Least Squares and Kronecker Product Least Squares Problems. Florida Institute of Technology, Melbourne, FL, USA.

- 
- Wu, L., 2003. A parameter choice method for Tikhonov regularization. *Electron. Trans. Numer. Anal.* 16, 107–128.
- Yuan, Q., Zhang, L., Shen, H., Li, P., 2010. Adaptive Multiple-Frame Image Super-Resolution Based on U-Curve. *IEEE Trans. Image Process.* 19, 3157–3170.
- Zhu, Y., Sun, L., Xu, H., 2011. L-Curve Based Tikhonov's Regularization Method for Determining Relaxation Modulus From Creep Test. *J. Appl. Mech.* 78, 031002–031002.

## **IV.2. Modélisation inverse de la dispersion atmosphérique: Algorithme de recherche de la position de la source**

---

*Dans ce chapitre, nous présentons notre méta-algorithme qui a été développé pour identifier la position d'une source de pollution atmosphérique inconnue à l'échelle locale. Après la présentation de la philosophie générale de cette méthode de recherche itérative, nous discutons le choix du meilleur critère d'arrêt (ou de sélection de la meilleure solution) le plus convenable dans des situations pratiques pour ce type de problèmes. Ces critères sont testés sur des situations fictives de recherche de position en utilisant l'algorithme inverse présenté dans le chapitre précédent et les mesures synthétiques fournies par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK. Après avoir étudié la sensibilité de cet algorithme à retrouver le débit et la position de la source selon l'emplacement des récepteurs (en utilisant des configurations typiques de disposition des récepteurs), nous avons appliqué cette approche sur des situations de géométries urbaines complexes à l'échelle locale utilisant des mesures de concentration en soufflerie.*

---

### **IV.2.1. Introduction**

La détermination rapide de la position et du débit d'émission d'une source accidentelle ou terroriste constitue une aide importante apportée aux autorités pour leur permettre de prendre les meilleures décisions et les meilleures mesures de sécurité afin d'éviter les risques ou afin de gérer au mieux les situations de crise. Bien que les risques et les aléas soient très variés et très présents dans les milieux urbains et industriels à l'échelle locale, nous ne trouvons dans la littérature qu'un nombre assez limité d'études (Brereton et Johnson, 2012; Keats et al., 2007a) traitant de ce type de problèmes à ces échelles, où la géométrie des milieux est assez complexe. Contrairement au chapitre précédent et à plusieurs autres études de recherche qui s'intéressent seulement à reconstruire les débits d'émission d'une source de pollution dont la position est supposée connue, nous présentons dans ce chapitre un autre algorithme inverse qui permet d'identifier à la fois l'emplacement et le débit d'émission d'une source ponctuelle de pollution atmosphérique à l'échelle locale, sans utiliser d'information a priori sur le terme source. Après avoir présenté en détail le principe de cette méthode (IV.2.2.1), nous étudions sa fiabilité par rapport aux critères d'arrêts (IV.2.3) et par rapport à l'emplacement des récepteurs choisis (IV.2.4). Dans la dernière partie de ce chapitre, nous appliquons ce système de modélisation inverse en utilisant des mesures de concentration effectuées en soufflerie. L'objectif est d'étudier la fiabilité de cet algorithme à reproduire le débit et la position de la source dans un milieu urbain complexe en utilisant différents modèles de dispersion atmosphérique.

### **IV.2.2. Algorithme inverse**

#### **IV.2.2.1. Principe de base de la méthode de recherche en grille**

La nature du problème de recherche de la position de la source est totalement différente de celle de l'identification des débits d'émission parce que les coordonnées des sources ne sont pas linéaires par rapport aux informations mesurées (les concentrations en polluants). La formulation du problème présenté dans le chapitre précédent n'est donc plus valable pour la recherche de la position de la source. Cependant, nous avons implémenté dans ce travail un méta-algorithme

s'inspirant largement de la linéarité entre les concentrations et les débits. En effet, la méthode utilisée repose sur l'utilisation séquentielle de l'algorithme inverse de reconstruction des débits d'émission présenté précédemment. Dans ce cas, nous supposons que toutes les positions possibles des sources sont connues suivant une discrétisation choisie et l'objectif est alors de choisir la meilleure solution (position) qui minimise la fonction coût ou satisfait le critère d'arrêt  $J$  (Figure IV.25).

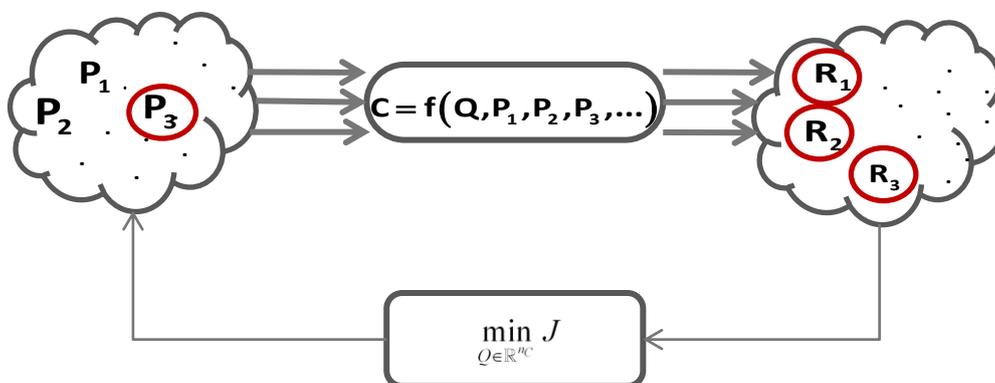


Figure IV.25 : Principe de la méthode de recherche en grille

Cette technique d'identification de la position est appelée « recherche en grille » (Bronner et al., 2008). Il s'agit d'une méthode directe d'inversion qui consiste à sélectionner la meilleure position après avoir discrétisé le domaine de recherche en un nombre fini de positions a priori  $P_i$  (Krysta et Bocquet, 2007). L'algorithme de cette méthode est présenté en détail dans la section suivante (IV.2.2.2). Dans la pratique, nous construisons une base de données qui comporte tous les résultats de simulations directes effectuées par le modèle de dispersion atmosphérique pour toutes les positions possibles de la source à chercher. La discrétisation est réalisée suivant les besoins pour chaque zone d'étude sur laquelle nous souhaitons appliquer cet algorithme. Ensuite, en situation de crise, nous ne réalisons que l'évaluation de la fonction coût en lançant d'une manière itérative les calculs inverses par l'algorithme d'optimisation dont le temps de calcul est assez faible. La même philosophie a été appliquée par Sohn et al. (2002) qui ont testé un algorithme bayésien sur une base de données préétablie dans laquelle tous les emplacements possibles de sources et toutes les formes possibles d'émissions sont énumérés et stockés. Ce méta-algorithme inverse peut constituer, en association avec les modèles opérationnels développés par l'équipe AIR du LMFA, une plate-forme spécifique d'aide à la décision utilisable pour gérer des situations de crise de rejets accidentels et instationnaires de contaminants (fuites, accidents industriels, actes terroristes, incendies,...) dans des milieux complexes caractérisés par une forte densité d'obstacles. La connaissance rapide des caractéristiques de la source de polluants peut en effet permettre d'évaluer les meilleures mesures de sécurité à prendre dans les différentes phases d'urgence et en post-rejet.

#### IV.2.2.2. Méthode de la « recherche en grille » modifiée

Bien que l'algorithme de recherche adopté dans cette étude s'appuie sur la méthode directe de « recherche en grille » en testant un nombre fini de solutions possibles, le choix de la solution optimale est fait d'une manière assez différente de la méthode classique. En effet, nous ne choisissons pas la meilleure position qui optimise l'écart entre les concentrations observées et calculées par le modèle direct, mais nous gardons celle qui minimise l'écart entre les débits inversés en utilisant les mesures fournies par chaque récepteur séparément. La Figure IV.26 illustre le principe

de fonctionnement de cette méthode d'inversion. L'implémentation numérique de cet algorithme de recherche de la position est constituée par les instructions suivantes :

1. Discrétiser la zone de recherche en un nombre fini de positions possibles suivant un pas défini par avance. Chaque position représente un emplacement a priori de la source.
2. Choisir la position de départ  $S_i$ .
3. Lancer le modèle direct de dispersion atmosphérique pour reconstruire la matrice  $CTA$  définie dans le chapitre précédent. Cette étape ne peut être réalisée qu'après le choix de la position des récepteurs à utiliser dans l'inversion. L'application de cette méthode nécessite au minimum trois récepteurs comme indiquée sur la Figure IV.26.
4. Récupérer les mesures de concentration en chaque récepteur.
5. Appliquer successivement pour chaque récepteur (trois dans ce cas) le système de modélisation inverse de débit, détaillé dans le chapitre précédent, pour calculer les débits d'émission à cette position potentielle en utilisant à chaque fois la concentration mesurée pour chaque récepteur. Par exemple, sur la Figure IV.26, les débits  $Q^S(R_1)$ ,  $Q^S(R_2)$  et  $Q^S(R_3)$  sont estimés en utilisant respectivement les concentrations mesurées par R1, R2 et R3.
6. Evaluer et stocker la valeur  $J_i$  ((IV.2-1) ou (IV.2-2) ou (IV.2-3)) de la fonction coût pour cette position.
7. Recommencer les mêmes instructions à partir de l'étape 3 pour tous les autres emplacements possibles de la source.
8. Choisir la position optimale de la source qui minimise la fonction coût  $J$ .

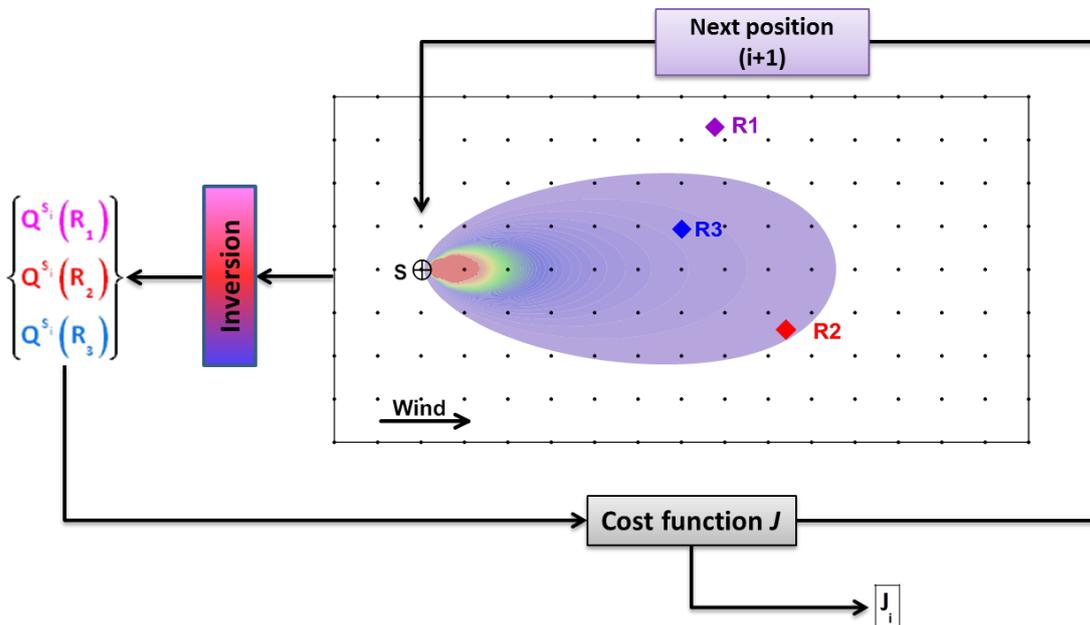


Figure IV.26: Principe de fonctionnement de l'algorithme de recherche de la position de la source adopté dans ce travail.  $Q^S(R_k)$  est le débit d'émission estimé à partir des concentrations au récepteur  $R_k$  si la source est située à la position  $S_i$ .  $J_i$  est la valeur évaluée de la fonction coût qui correspond à la position  $S_i$ .

Il est clair que cette méthode ne peut s'appliquer correctement qu'avec au minimum trois récepteurs différents. La position retenue de la source est souvent celle qui garantit un écart minimal entre les différents débits inversés. Cette comparaison permet de déterminer d'une manière adjointe

la position de la source qui assure des contributions plus réalistes dans chaque emplacement des récepteurs. Le débit d'émission estimé est la moyenne de trois signaux de rejets inversés qui correspond à la meilleure position de la source.

Cette méthode est assez similaire à celle de Sharan et al. (2012). En effet, l'identification de la position de la source consiste à minimiser une fonction coût après avoir déterminé en première étape les débits d'émissions. La méthode de résolution présentée par Sharan et al. (2012) repose sur la minimisation de la somme des carrés des résidus entre les mesures aux récepteurs et les prédictions du modèle de dispersion. Par contre la méthode implémentée dans cette étude consiste à évaluer une nouvelle fonction coût différente de celle des moindres carrés en tout point de la grille (pour toutes les positions possibles). Cette fonctionnelle se base sur une comparaison des débits inversés pour chaque position a priori, en utilisant séparément les signaux de concentration enregistrés aux récepteurs. Matthes et al. (2004) ont également présenté une méthode d'identification en deux étapes assez similaire reposant sur la solution analytique de l'équation de diffusion dans un milieu isotrope. Néanmoins, ils ont utilisé le chemin inverse de Sharan et al. (2012) parce qu'ils ont déterminé en premier lieu la position de la source en minimisant une fonction coût quadratique, puis ils ont estimé le débit d'émission correspondant à cette position.

L'avantage de notre méta-algorithme est qu'il n'utilise pas de méthode de calcul lourde dans les algorithmes inverses telles que les techniques probabilistes (Delle Monache et al., 2008; Keats et al., 2007a; Politis et Robertson, 2004; Senocak et al., 2008; Yee et al., 2008), les modèles adjoints (Liu and Zhai, 2007; Müller et Stavrakou, 2005; Pudykiewicz, 1998; Quélo et al., 2005; Skiba, 2003; Vautard et al., 2000) et les méthodes itératives d'optimisation sous-jacentes (Akçelik et al., 2003; Krysta et al., 2006; McGrail, 2001; Quélo et al., 2005; Rudd et al., 2012) qui nécessitent obligatoirement des informations a priori (ébauche) sur le terme source. La fiabilité des résultats de ce système de modélisation inverse est fortement liée au critère de choix de la meilleure solution comme pour toutes les méthodes itératives. C'est pourquoi nous étudions dans la section suivante le comportement de cet algorithme par rapport à 3 critères différents.

### IV.2.3. Test des fonctions coût

L'utilisation des algorithmes de recherche itérative nécessite souvent un bon choix des fonctions coût qui permettent de répondre aux exigences pratiques. Pour cela, nous testons dans cette section le comportement de notre méta-algorithme inverse avec trois fonctionnelles différentes. Un travail assez similaire a été effectué par Thomson et al. (2007) qui ont évalué la performance de trois fonctions coûts intégrées dans un algorithme de recherche aléatoire couplé avec la méthode de recuit simulé.

#### IV.2.3.1. Scénario de base

Pour assurer une bonne comparaison entre les résultats obtenus par chaque fonction coût, nous avons utilisé le même scénario de base pour les différentes simulations. Dans ce cas, les signaux de concentration sont des mesures synthétiques fournies directement par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK utilisant une source fixe située aux coordonnées  $X=1000\text{m}$ ,  $Y=0\text{m}$  et  $Z=10\text{m}$ . Le débit d'émission est le même que celui présenté dans le chapitre précédent (Figure IV.30). Pour simplifier le calcul, la direction du vent est supposée connue. Cette hypothèse nous permet de limiter la zone de recherche en utilisant la théorie du rétro-panache (relation source-récepteur) ou la théorie du « modèle récepteur » de (Haupt, 2005). En effet, nous ne testons que les positions des sources de la grille qui peuvent contribuer en même temps aux différents récepteurs utilisés dans

l'inversion (Figure IV.27). Cette zone de recherche a été définie comme une « région d'influence » par Keats et al. (2007b) en se basant sur le principe de fonctionnement des modèles adjoints. De même, Robertson (2004) a montré que l'utilisation des modèles adjoints peut aboutir aux mêmes résultats que des modèles de rétro-trajectoire en traçant les principales sources qui contribuent au niveau des récepteurs.

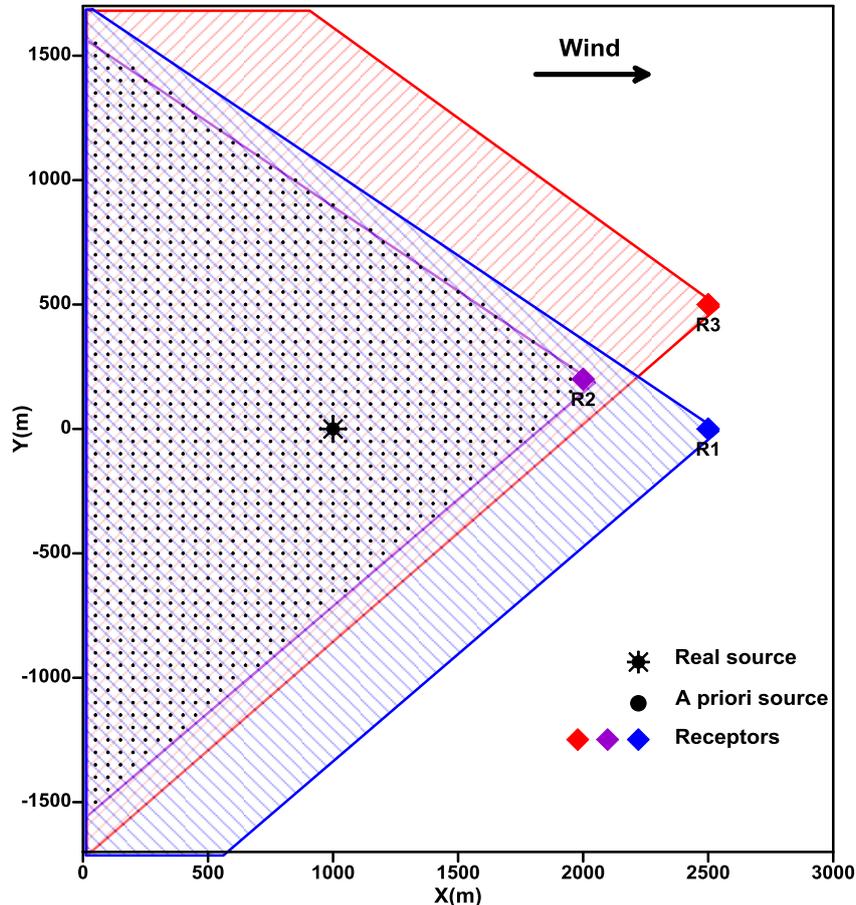


Figure IV.27 : Limitation du domaine de recherche de la source. Les points noirs illustrent les 1253 positions possibles de la source et les trois losanges en couleurs indiquent les positions des récepteurs utilisés dans l'inversion.

### IV.2.3.2. Erreur relative maximale de l'émission totale

Le premier critère d'arrêt testé est celui qui quantifie l'erreur relative maximale des émissions totales entre les signaux inversés deux à deux :

$$CR1(\%) = \max_{i \neq j} \left( \left| \frac{Qtt(R_i) - Qtt(R_j)}{Qtt(R_i)} \right| * 100 \right) \quad (IV.2-1)$$

où :  $Qtt(R_i) = \int_{t_0}^{t_f} Q_{inv}^t(R_i) dt$  est la quantité de masse totale calculée en utilisant les mesures de concentration au niveau du récepteur  $R_i$ .

La Figure IV.28 illustre l'évaluation de ce critère  $CR1$  à chaque position possible de la source dans la zone de recherche. Il s'agit des iso-contours des valeurs des erreurs dans le plan de coordonnées  $(X, Y)$ . On constate bien que ce critère permet d'identifier exactement la position de la source réelle puisque l'on n'a qu'un seul minimum global dans toute la zone de recherche (Figure IV.29). Les

flèches noires orientées dans le sens opposé au gradient de la fonctionnelle, sur la Figure IV.28, montrent que l'utilisation de cette fonctionnelle permet de retrouver la position de la source en utilisant n'importe quel algorithme itératif classique d'optimisation et en commençant par n'importe quel point de départ. En effet, le gradient de la fonctionnelle converge vers la position de la source avec une erreur relative maximale de l'émission totale inférieure à 10% comme illustré par l'échelle de couleur de la Figure IV.28. Cependant, il faut noter que ce critère ne porte que sur des variables qui fournissent une information globale sur le débit. La fiabilité de l'utilisation de cette fonction coût s'arrête donc à l'identification de la meilleure position de la source et à l'estimation de la quantité totale de masse rejetée dans l'atmosphère sans avoir de précisions supplémentaires sur l'évolution temporelle du signal de débit.

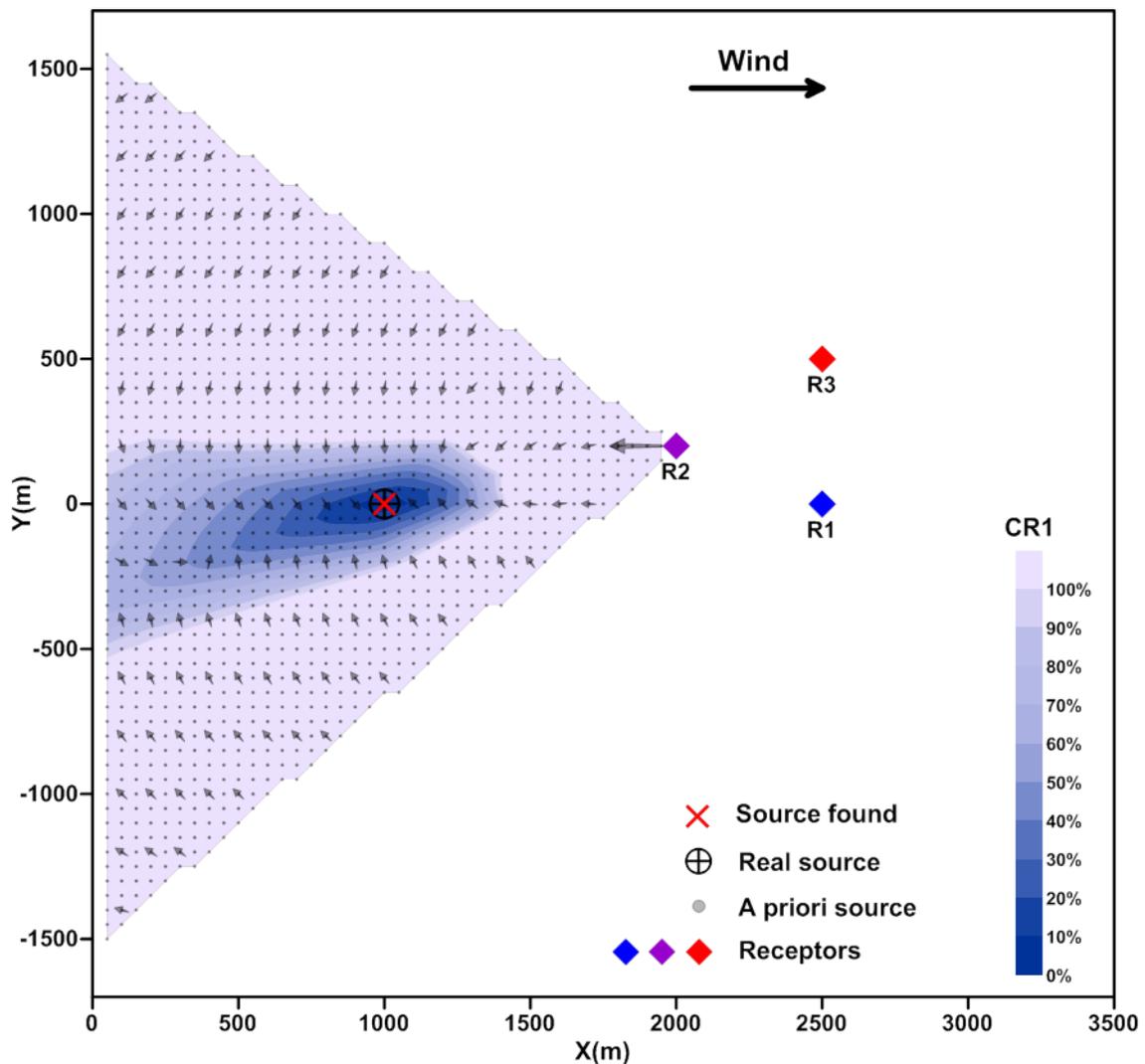


Figure IV.28 : Iso-contours d'évolution de l'erreur relative de la quantité de masse totale dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent l'opposé du gradient d'évolution de la fonctionnelle en X et Y.

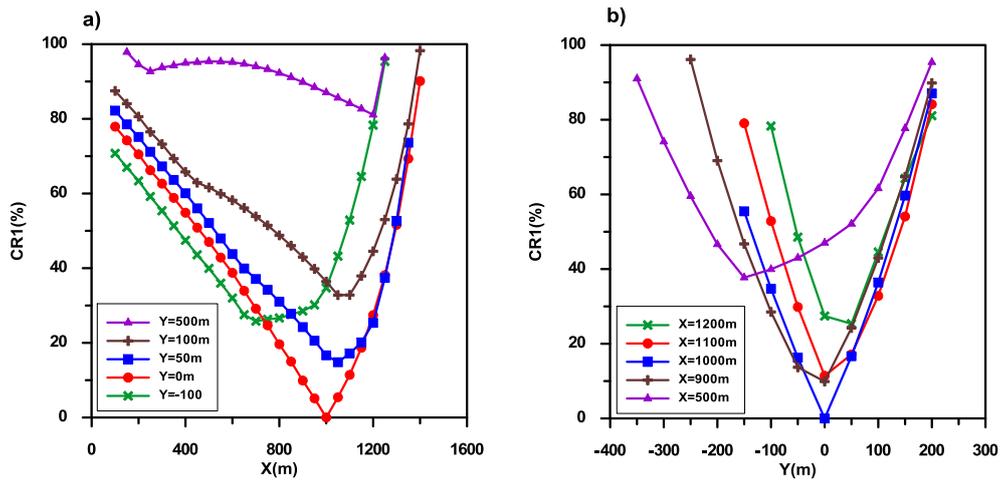


Figure IV.29 : Variation des valeurs de la fonction coût suivant X (a) et Y (b) à différentes distances de la position réelle de la source.

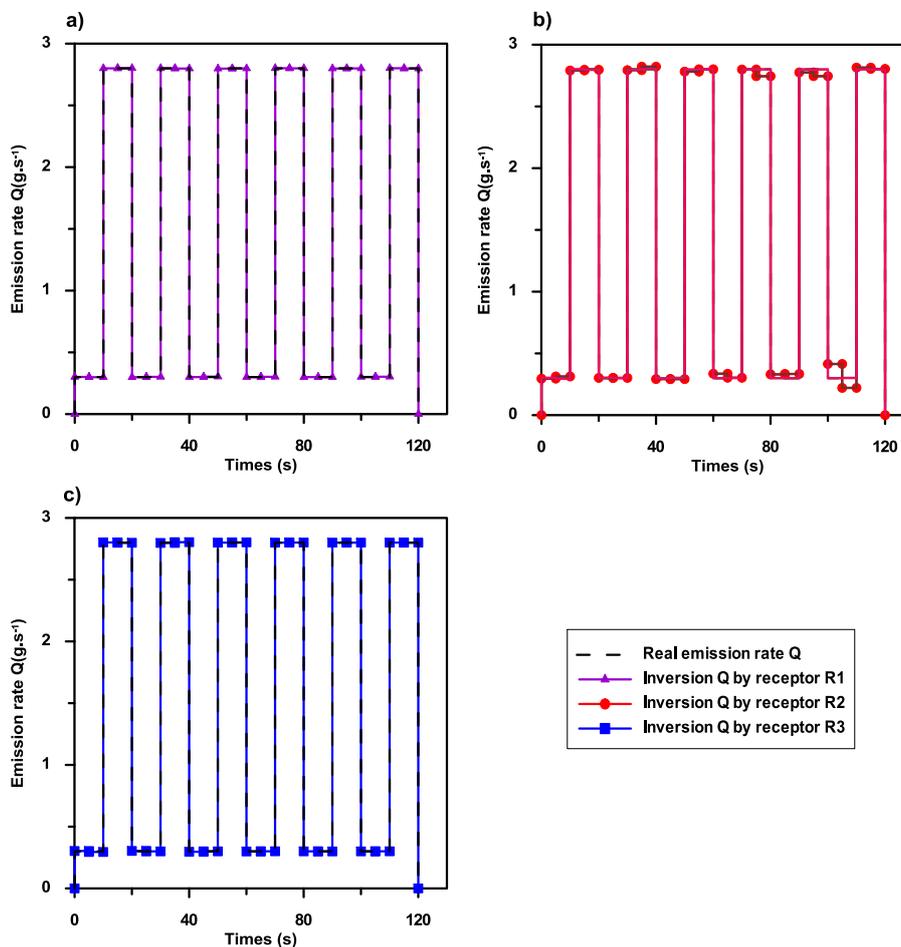


Figure IV.30 : Les trois débits inversés pour la meilleure position en utilisant respectivement les concentrations mesurées aux récepteurs R1 (a), R2 (b) et R3 (c).

### IV.2.3.3. Moyenne de l'erreur relative maximale

Contrairement à la section précédente dans laquelle nous avons utilisé une erreur systématique, nous testons dans ce paragraphe une erreur locale qui permet de fournir une information sur la forme du signal inversé du débit d'émission. Il s'agit de déterminer la moyenne de

l'erreur relative maximale entre les signaux inversés. Cette fonctionnelle permet de comparer les débits inversés deux à deux à chaque instant et pour chaque position dans la zone de recherche :

$$CR2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \max \left( \frac{Q_{inv}^k(R_i) - Q_{inv}^k(R_j)}{Q_{inv}^k(R_i)} * 100 \right)_{i \neq j} \quad (IV.2-2)$$

où  $N$  est le nombre de combinaisons possibles de couple de récepteurs. Dans ce cas,  $N$  est égal à 3 puisque nous avons 3 récepteurs.

Les résultats d'estimation de ce critère à chaque position de la zone de recherche sont illustrés sur la Figure IV.31. Bien que cette fonctionnelle nous permette de retrouver la position exacte de la source réelle avec une erreur relative maximale relativement faible de l'ordre de 5.6%, elle n'est pas fiable pour des applications pratiques. En effet, l'utilisation de ce critère d'arrêt ne permet de résoudre des problèmes inverses de recherche de la position qu'avec une discrétisation assez fine du domaine puisque la zone identifiée est très localisée et quasi-superposée à la solution vraie. Cette méthode ne permet pas d'identifier la source réelle avec cette fonctionnelle si les positions a priori choisies sont décalées de quelques mètres de la position de la source réelle. De même pour des raisons numériques, les flèches de gradient de valeurs présentés dans la Figure IV.31 illustrent qu'il est impossible de converger numériquement vers la solution globale en partant de tout autre point de la grille différent de la position réelle de la source. La Figure IV.32 (coupes transversales et longitudinales de la carte des iso-contours illustrée dans la Figure IV.31) met en évidence que notre solution optimale est assez locale, ce qui n'est pas identifiable par des moyens numériques d'optimisation classiques puisqu'on a une vingtaine de solutions optimales locales dans chaque profil.

#### IV.2.3.4. Moyenne de l'erreur relative maximale normalisée par la quantité de masse totale

Pour des raisons pratiques, nous testons maintenant un critère d'arrêt qui englobe à la fois les caractéristiques locale et globale du signal de débit. Il s'agit d'un critère hybride défini par le rapport entre la moyenne des écarts maximaux des différents signaux et la quantité de masse minimale estimée :

$$CR3 = \frac{\left( \frac{1}{N} \sum_{t=1}^{t_f} \left( \max \left( |Q_{inv}^t(R_i) - Q_{inv}^t(R_j)|_{i \neq j} \right) * \Delta t \right) \right)}{\min(Q_{tt}(R_i))_{i=1..n_r}} * 100 \quad (IV.2-3)$$

où  $N$  est le nombre de combinaisons possibles de couples de récepteurs.  $N$  est égal à 3, puisque nous avons 3 récepteurs dans ce cas.  $n_r$  est le nombre de récepteurs utilisés dans l'inversion.

Le calcul de ce critère nécessite tout d'abord la détermination de l'écart maximal que l'on peut avoir entre les trois débits inversés deux à deux. L'estimation de ce critère dans chaque position possible prédéfinie est illustrée dans la Figure IV.33. Nous constatons d'après cette figure que l'utilisation de ce critère hybride est assez pratique pour des applications réelles à l'échelle locale parce qu'il permet de limiter la zone de localisation de la source (à 100\*500 m près) avec une erreur inférieure à 10% par rapport au débit réel. Cependant, nous remarquons également que la mise en œuvre numérique de cet algorithme de recherche utilisant ce critère d'arrêt n'est fiable que lorsque la position initiale de la méthode itérative est assez loin de la source. En effet, nous constatons que nous avons deux zones différentes dont chacune se caractérise par des comportements d'évolution du gradient assez différents.

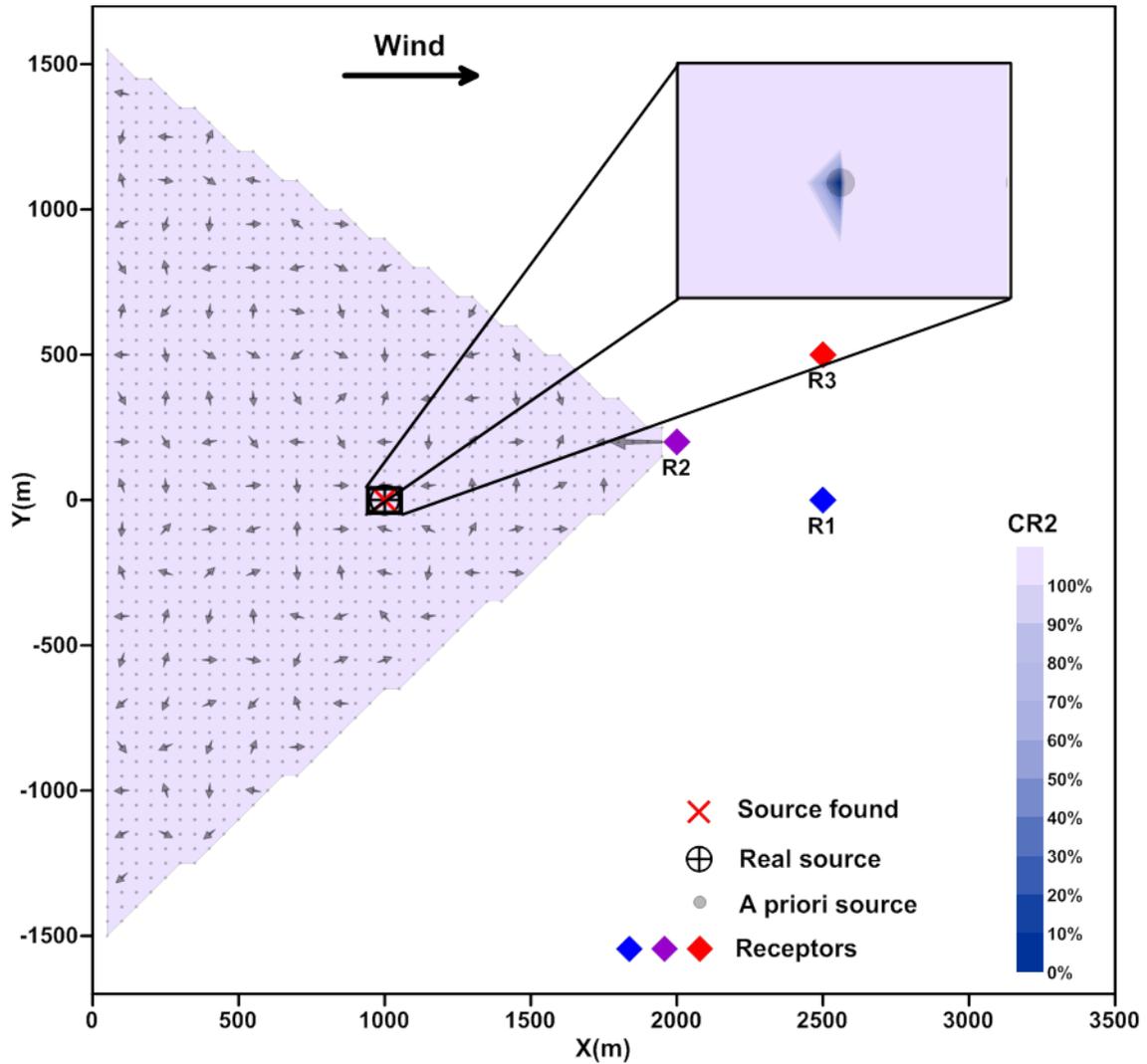


Figure IV.31 : Iso-contours d'évolution de la moyenne de l'erreur relative maximale dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent le gradient d'évolution de la fonctionnelle CR2 en X et Y.

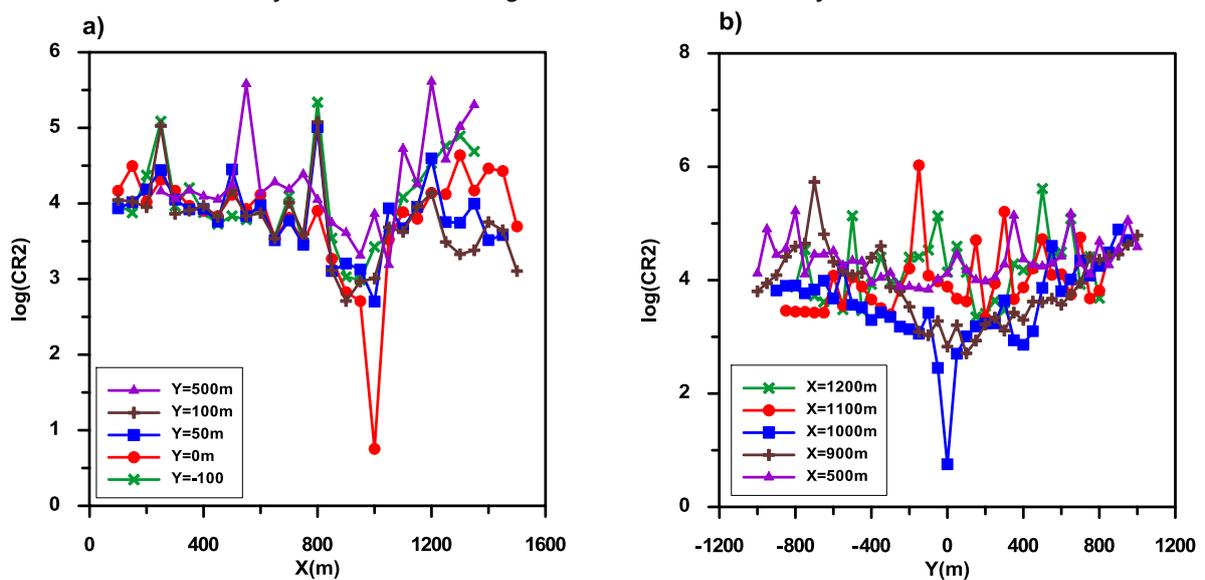


Figure IV.32 : Coupes longitudinales (a) et transversales (b) effectuées sur la grille de la Figure IV.31 à différentes distances de la position réelle de la source.

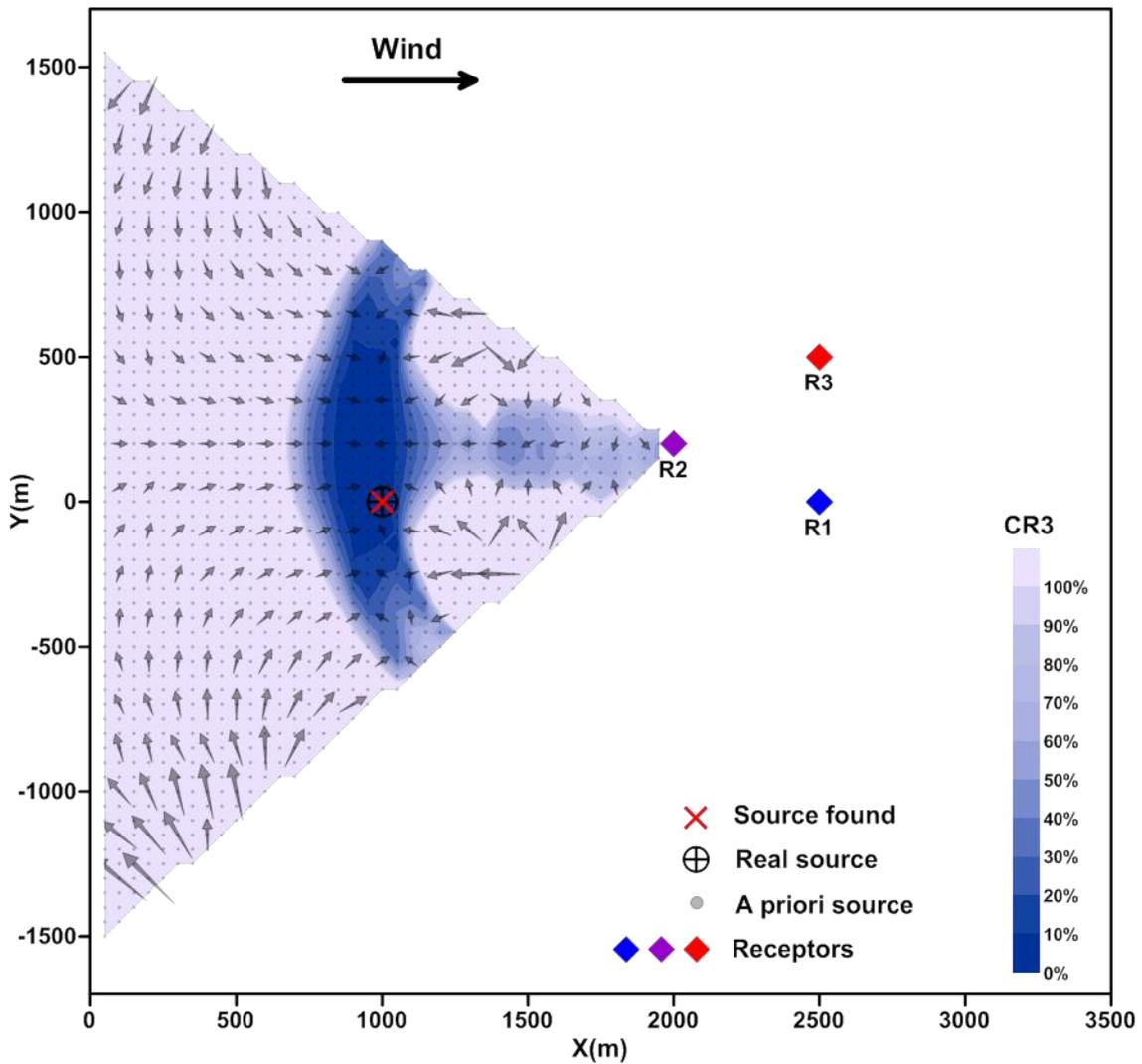


Figure IV.33 : Iso-contours d'évolution de la fonction hybride CR3 dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent le gradient d'évolution de cette fonction coût CR3 en X et Y.

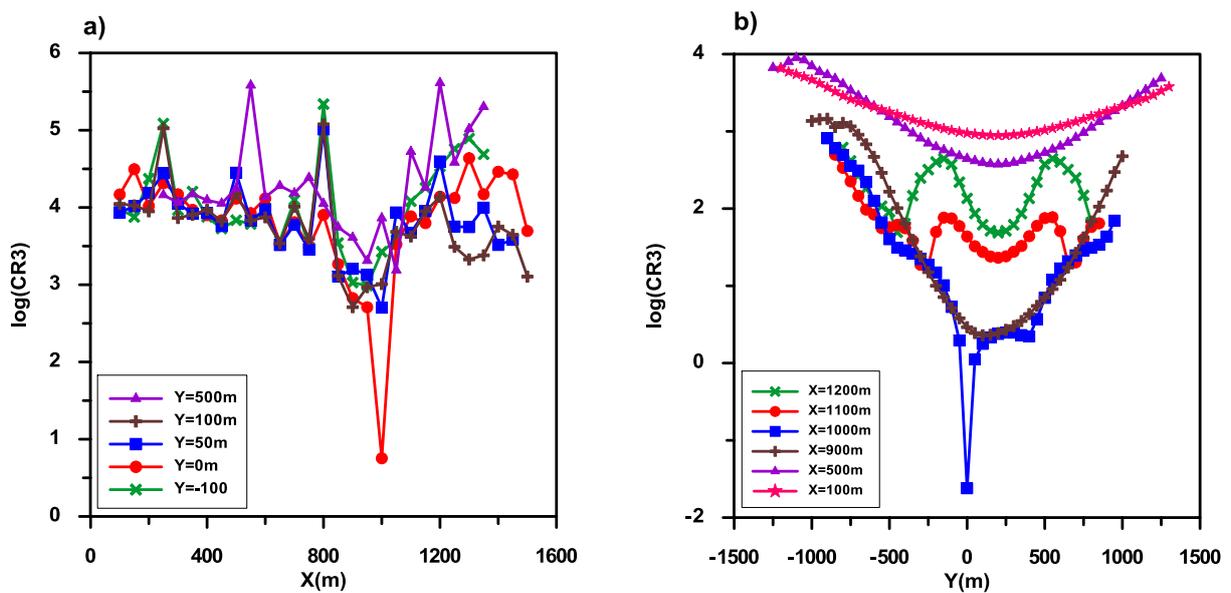


Figure IV.34: Coupes monodimensionnelles de la fonction coût CR3 suivant X (a) et Y (b) à différentes distances de la position réelle de la source.

Dans la zone à gauche de la position de la source, l'algorithme converge vers la région de localisation qui contient la solution exacte. Par contre la deuxième région à droite de la position réelle se caractérise par un gradient assez agité. Cela prouve que l'utilisation de ce critère avec un algorithme d'optimisation itérative ne converge pas vers le minimum global si la position initiale (ébauche) fait partie de cette zone (en aval de la position réelle de la source). Ce comportement a été bien illustré sur la Figure IV.34 qui montre quelques profils longitudinaux et transversaux de variation de cette fonctionnelle. En effet, nous remarquons que tous les profils transversaux pour des  $X \leq 1000\text{m} = X_{s\_réelle}$  admettent des minimums globaux. Bien que la solution soit assez bien localisée pour  $X=1000\text{m}$  (Figure IV.34-b), comme dans le cas du critère *CR2*, la solution optimale est ici unique. C'est-à-dire que même si la discrétisation adoptée ne contient pas la position réelle de la source, l'algorithme itératif nous donnera la valeur la plus petite et la plus proche disponible parmi les solutions possibles testées puisqu'il n'y pas d'autres minimums locaux.

#### IV.2.4. Etude de sensibilité aux emplacements des récepteurs

Pour étudier la fiabilité des résultats de notre méthode inverse par rapport aux emplacements des récepteurs utilisés, nous avons adopté 9 configurations différentes de position des récepteurs. Le scénario de base utilisé est le même que celui utilisé dans le paragraphe précédent où les émissions sont stationnaires et notre source réelle placée aux coordonnées ( $X=1000\text{m}$ ,  $Y=0$ ,  $Z=10\text{m}$ ). De même, nous supposons dans ce paragraphe que la zone de recherche des sources a priori est la même que la précédente pour la même direction du vent. Sur la Figure IV.35, nous avons présenté les points de mesure utilisés pour constituer les différentes configurations citées dans le Tableau IV.2. Nous nous fondons dans le choix de ces configurations principalement sur les travaux de recherche de Roussel et al. (2002) qui ont présenté quelques dispositions typiques des capteurs utilisés pour identifier une source de pollution atmosphérique.

	Récepteurs	Observations
Configuration 1	R1, R2 et R3	Même configuration étudiée dans la section précédente
Configuration 2	R2, R9 et R10	Récepteurs bien dispersés
Configuration 3	R2, R7 et R8	Récepteurs peu dispersés
Configuration 4	R2, R6 et R7	Récepteurs alignés dans le sens de l'écoulement
Configuration 5	R1, R11 et R12	Récepteurs alignés avec la source dans le sens de l'écoulement
Configuration 6	R2, R4 et R5	Récepteurs peu dispersés, alignés perpendiculairement à l'écoulement
Configuration 7	R5, R11 et R13	Récepteurs bien dispersés et alignés perpendiculairement à l'écoulement
Configuration 8	R4, R11 et R14	Récepteurs peu dispersés et alignés perpendiculairement à l'écoulement dont deux d'entre eux sont symétriques
Configuration 9	R2, R11 et R13	Récepteurs dispersés et alignés perpendiculairement à l'écoulement dont deux d'entre eux sont symétriques

Tableau IV.2 : Différentes configurations (disposition des récepteurs) utilisées dans l'inversion

Dans ce cadre, nous avons étudié diverses configurations dans lesquelles les récepteurs sont relativement peu dispersés (configurations 3, 6 et 8) ou bien dispersés (configurations 1, 2 et 7). Par ailleurs, nous comparons la fiabilité de cet algorithme pour des emplacements de récepteurs non

alignés (configurations 1, 2 et 3) et alignés (configurations 4 et 5) ou perpendiculairement (configurations 6, 7, 8 et 9) au sens de l'écoulement, comme le montre la Figure IV.35.

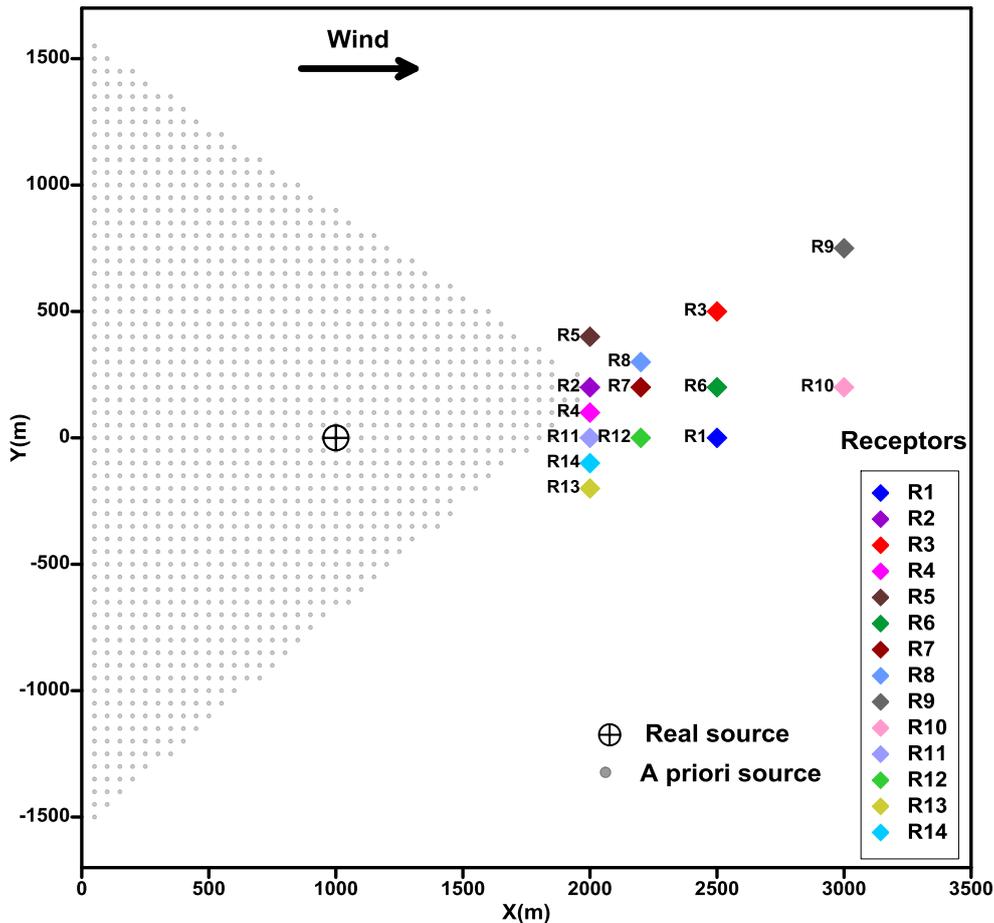


Figure IV.35 : Emplacements des récepteurs utilisés dans l'étude de sensibilité du système de modélisation inverse

Les Figures IV.36, IV.37 et IV.38 illustrent les iso-contours d'évaluation des différentes fonctionnelles dans le domaine de recherche de la position de la source. Nous avons utilisé dans ce cas une nouvelle échelle de couleur dans les figures de  $CR2$  pour bien évaluer qualitativement la réponse du système de modélisation inverse. Les zones blanches dans toutes les figures correspondent à des valeurs des critères supérieures à celles indiquées sur les échelles de couleur. Nous observons sur ces figures (Figure IV.36, Figure IV.37 et Figure IV.38) que la qualité des résultats de l'algorithme inverse est assez sensible aux positions des récepteurs. La comparaison entre les deux premières configurations (config 1 et 2), où les récepteurs sont relativement bien dispersés, montre que la réponse du système de modélisation inverse est quasiment identique. D'autre part, nous observons que même avec des récepteurs moins dispersés dans l'espace, nous pouvons localiser exactement la position de la source et reconstruire les débits d'émission avec des erreurs relativement faibles (Figure IV.36). Néanmoins, ce type d'emplacement (récepteurs peu dispersés) a une limitation majeure pour certains cas particuliers lorsque la position de la source est assez éloignée (par rapport à la distance qui sépare les trois récepteurs). Par exemple, pour d'autres configurations où les récepteurs sont plus proches l'un de l'autre (configuration 8 illustrée sur la Figure IV.38), nous remarquons que l'algorithme n'a pas réussi à retrouver la meilleure position de la source en utilisant les critères de choix  $CR2$  et  $CR3$ . En fait, pour des récepteurs très peu dispersés, les signaux de concentration observés sont similaires (voire identiques) lorsque la source est assez

loin, c'est-à-dire lorsque les distances qui séparent la source et les trois récepteurs sont beaucoup plus importantes que les distances entre les récepteurs. Dans ce cas, on pourrait avoir les mêmes résultats statistiques d'inversion de débit qui conduisent à une autre solution totalement écartée de la vraie position de la source avec un débit d'émission incorrect.

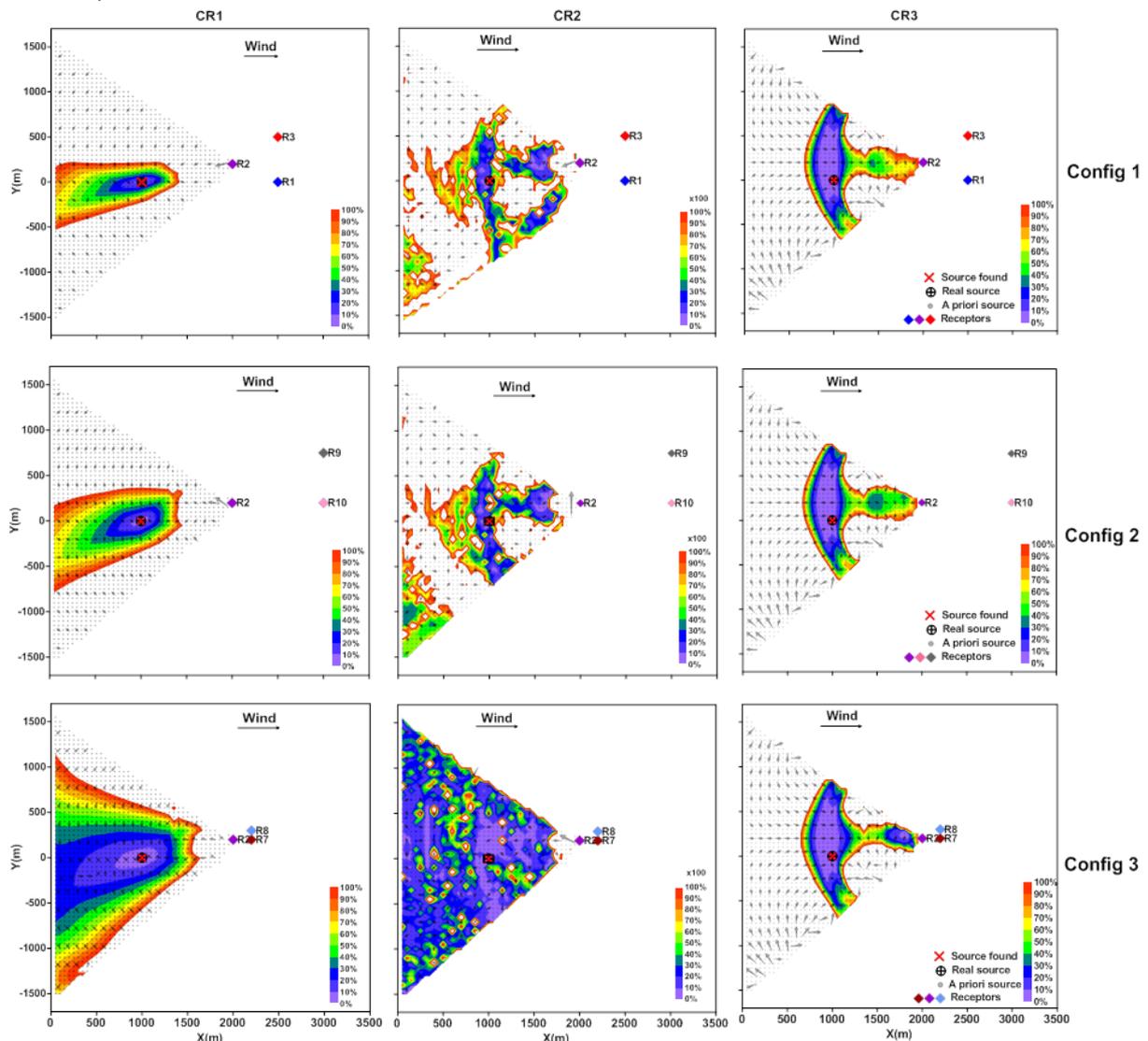


Figure IV.36 : Iso-contours d'évolution des fonctionnelles CR1, CR2 et CR3 (de gauche à droite) pour les configurations 1, 2 et 3 (du haut vers le bas) dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent l'opposé du gradient d'évolution de ces fonctions coût en X et Y. La surface blanche dans la zone de recherche correspond aux critères supérieurs au 100%

La Figure IV.37 montre que l'utilisation des trois récepteurs alignés dans le sens de l'écoulement (direction du vent) fournit un comportement quasi-symétrique par rapport à l'axe des récepteurs pour les trois fonctions coût mises en œuvre (configurations 4 et 5). Ce comportement était tout à fait attendu puisque nous étudions un écoulement dans une couche limite atmosphérique où les matrices des coefficients de transfert atmosphérique, pour chaque source, sont construites par le modèle SIRANERISK et où la dispersion et la diffusion sont par définition parfaitement symétriques par rapport à l'axe du vent. Et bien évidemment, lorsque les récepteurs ne sont pas alignés avec la vraie position de la source (config 4), il y a deux points symétriques de la grille de recherche qui peuvent minimiser chaque fonction coût utilisée. La méthode inverse

développée dans ce travail fournit dans cette situation la position réelle de la source et son image par rapport à l'axe d'alignement des récepteurs. Néanmoins, l'algorithme réussit à reconstruire le débit d'émission correctement dans les deux cas (le même débit trouvé) dont l'erreur relative maximale est inférieure à 1%. Par contre dans le cas où les récepteurs sont bien alignés avec la position réelle de la source, l'algorithme ne retrouve qu'une seule position de la source qui correspond au vrai emplacement adopté dans les simulations réelles (Config 5 – Figure IV.37).

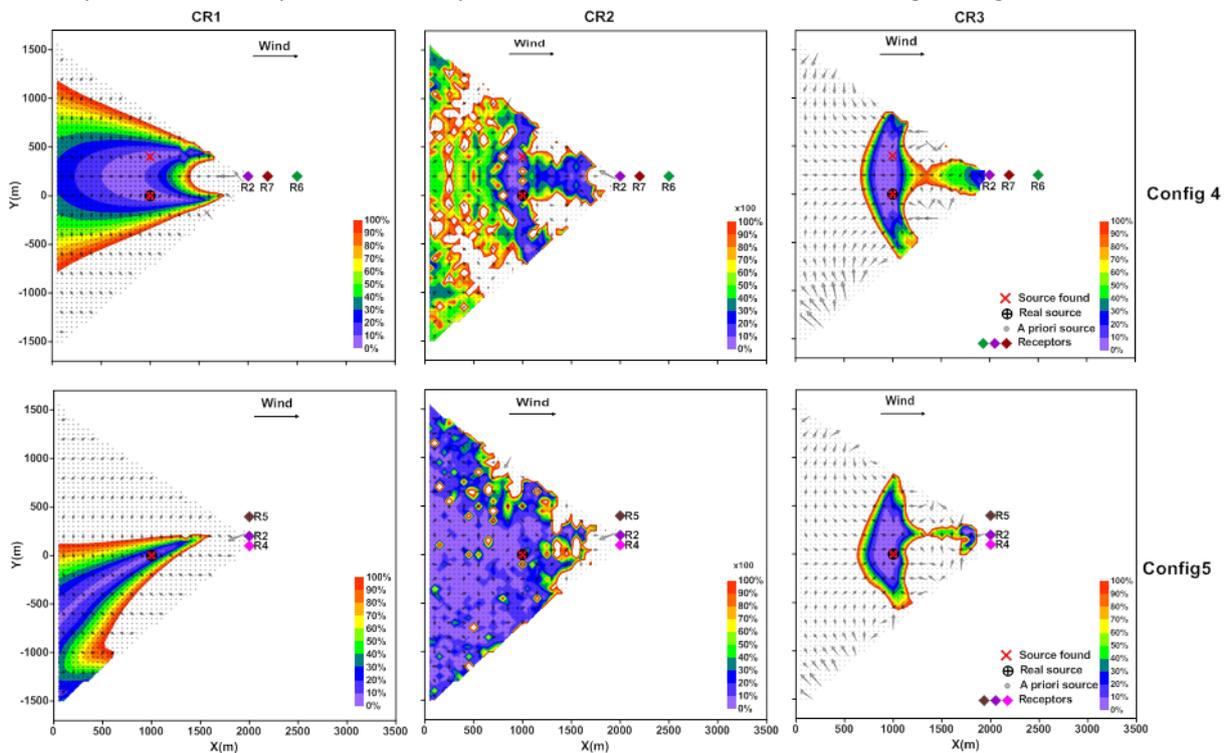


Figure IV.37 : Iso-contours d'évolution des fonctionnelles CR1, CR2 et CR3 (de gauche à droite) pour les configurations 4 et 5 (du haut vers le bas) dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent l'opposé du gradient d'évolution de ces fonctions coûts en X et Y.

La Figure IV.38 illustre la variation des résultats d'inversion obtenus en utilisant quatre configurations différentes de disposition. Il s'agit toujours de récepteurs alignés, placés perpendiculairement à la direction du vent. Nous constatons tout d'abord, que la réponse de l'algorithme inverse, illustrée par l'évolution des différents critères, est bien symétrique lorsqu'on utilise deux récepteurs symétriques (configurations 8 et 9). Ensuite, nous remarquons que l'utilisation du premier critère CR1 (erreur relative sur la quantité de polluants rejetée) met en évidence explicitement l'effet de rétro-panache. Nous remarquons en effet que la zone de forte probabilité de l'existence de la solution (erreur plus faible) varie énormément en fonction de l'écart entre les récepteurs. Cela est largement identifiable en comparant les figures des iso-contours de CR1 des deux configurations 8 et 9, présentées sur la Figure IV.38. Enfin, nous observons que l'utilisation des récepteurs alignés perpendiculairement à la direction du vent permet d'identifier correctement la position de la source sauf si les récepteurs ne sont pas suffisamment écartés. Cet échec est aussi limité à l'utilisation des critères qui évaluent les erreurs locales entre les signaux. En effet, le critère global CR1 a un comportement homogène pour les différentes configurations parce que la distance de la source par rapport aux récepteurs peut atténuer (lisser) les variations des signaux au niveau des récepteurs mais pas la quantité de masse totale reçue par chaque point de mesure.

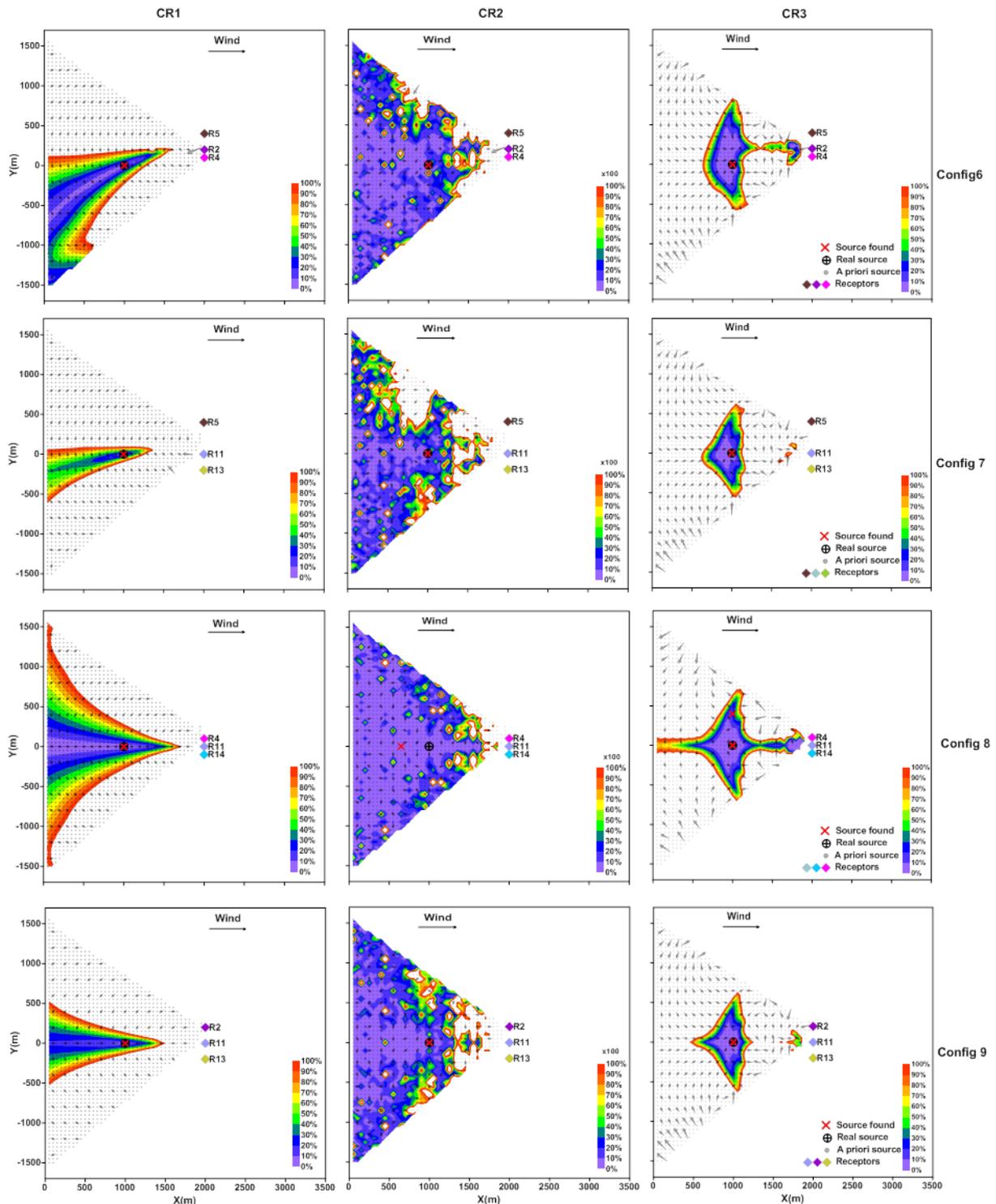


Figure IV.38 : Iso-contours d'évolution des fonctionnelles CR1, CR2 et CR3 (de gauche à droite) pour les configurations 6 à 9 (du haut vers le bas) dans le domaine de recherche. Les flèches illustrent l'opposé du gradient d'évolution de ces fonctions coûts en X et Y

Cet algorithme est plus performant et moins sensible aux variations des positions des récepteurs lorsqu'on utilise des critères d'optimisation globaux. En effet, comme expliqué précédemment, en s'éloignant de la source les signaux de concentrations au niveau des récepteurs deviennent de plus en plus similaires. Les formes des signaux des débits inversés en utilisant les observations de chaque récepteur seront donc quasiment identiques si les récepteurs sont assez

proches et la source est assez loin. Ce comportement peut donc perturber les résultats de l'algorithme si l'on met en place des fonctions coût qui évaluent les signaux localement (la forme des signaux). Mais, la mise en place de critères globaux, comme le critère *CR1*, permet de fournir une évaluation plus stable et plus homogène pour n'importe quelle configuration, excepté celle des récepteurs alignés avec la direction du vent. Cette analyse de sensibilité montre que l'emplacement et la distance des récepteurs par rapport aux sources n'a pas d'impact majeur sur la qualité des résultats si l'on s'intéresse uniquement à identifier la position de la source et la quantité totale de débit d'émission ou si l'on s'intéresse uniquement à reproduire des émissions stationnaires.

Nous représentons sur la Figure IV.39 l'évolution des erreurs relatives maximales et des erreurs relatives sur la quantité totale de polluants rejetées dans l'atmosphère en fonction de  $\gamma$  :

$$\gamma = \frac{\Delta_{\text{bary.-}3R}}{\Delta_{\text{bary.-sourc.}}} \quad (\text{IV.2-4})$$

où  $\Delta_{\text{bary.-}3R}$  est la moyenne des distances entre les points de mesure et leur barycentre pour chaque configuration et  $\Delta_{\text{bary.-sourc.}}$  est la distance qui sépare la position réelle de la source et le barycentre des récepteurs utilisés dans l'inversion comme illustré sur la Figure IV.39-a.

Bien que l'utilisation des récepteurs alignés et perpendiculaires à la direction du vent permette de retrouver correctement la vraie position de la source dans la plupart des cas, nous observons sur la Figure IV.39 que les erreurs d'estimation du débit sont souvent plus élevées que dans les trois autres configurations (config. 1, config. 2 et config. 3). Pour une recherche aveugle de la position et du débit instationnaire, ces erreurs sont considérées comme acceptables étant donnée la complexité du problème. La Figure IV.39 illustre que l'utilisation de récepteurs bien dispersés (config. 1 et config. 2) est meilleure pour avoir des informations correctes sur la forme des signaux de débit (dont l'erreur maximale ne dépasse pas 20%). De même, nous observons que l'algorithme inverse reste beaucoup plus fiable si nous ne nous intéressons qu'à identifier la position de la source et la quantité totale de polluant rejetée plutôt qu'à reproduire la forme des signaux d'émission.

Comme dans l'étude de la dispersion atmosphérique, le bon emplacement des récepteurs est très important pour avoir de bons résultats d'inversion. En effet, la qualité des résultats des modèles inverses est fortement liée à la qualité des observations aux récepteurs. D'après Chang et al. (1997), les meilleures positions des récepteurs sont celles qui permettent à la fois de récupérer le maximum d'informations représentatives (comme décrit dans (IV.1.3.1.2)), de détecter les valeurs maximales de concentration et qui ont une fréquence importante de mesure. Dans ce contexte, plusieurs approches de conception spatiale des réseaux de mesure (Calori et al., 1994; Karabelas et Sarigiannis, 2008; Munn, 1981) ont été développées pour répondre aux besoins de la modélisation directe de la dispersion atmosphérique et pour bien étudier la qualité de l'air. Malheureusement, il y a peu de travaux de recherche qui ont été destinés spécifiquement à l'optimisation des réseaux de récepteurs pour améliorer les résultats d'application de la modélisation inverse. Les études existantes actuellement sont souvent des tests d'évaluation de performance des algorithmes inverses en utilisant certaines configurations particulières d'emplacement des récepteurs, comme cela est fait dans les travaux de recherche de Roussel et al. (2002) et dans la section IV.2.4 de ce manuscrit. D'autres études développent des réseaux d'observation spécifique à l'application de la modélisation inverse dans une zone d'étude bien déterminée (zones industrielles généralement). Par exemple, Khlaifi et al. (2009) ont proposé dans leurs travaux une méthode de sélection des meilleurs réseaux de mesures basée sur la connaissance absolue de la zone d'étude et de ses particularités. Dans ces

travaux, la méthode de choix des meilleurs récepteurs est assez basique car elle est fondée principalement sur l'amélioration apportée par chaque récepteur dans l'inversion du terme source.

Dans cette étude, nous ne traitons pas le problème d'optimisation des réseaux de mesures utilisés pour l'inversion parce que l'analyse effectuée ci-dessus ne présente qu'une étude de sensibilité de notre algorithme inverse en fonction de quelques configurations typiques d'emplacement des récepteurs. Dans ce contexte, nous avons défini un nouveau paramètre adimensionnel  $\gamma$  (IV.2-4) pour bien évaluer la performance de l'algorithme par rapport à la dispersion des récepteurs et à leur distance par rapport à la source. Les Figures IV.39-b et IV.39-c montrent respectivement l'évolution des erreurs *ERQM* et *MER* en fonction de  $\gamma$ . Nous observons tout d'abord que la qualité des résultats est bien meilleure lorsque les valeurs de  $\gamma$  sont relativement grandes. Bien que les tendances d'évolution des erreurs dans les deux figures et pour les deux types de configuration (alignées ou non) soient assez similaires, nous observons que les valeurs sont plus petites en utilisant des récepteurs non alignés. On peut donc confirmer d'une part que la qualité des résultats de notre algorithme est plus fiable en utilisant des dispositions de récepteurs non alignées et d'autre part que sa performance est fortement liée aux valeurs de  $\gamma$ . En effet, l'algorithme fournit des résultats assez satisfaisants (avec une erreur relative maximale inférieure à 20%) si les récepteurs sont non alignés et si  $\gamma > 0.2$ .

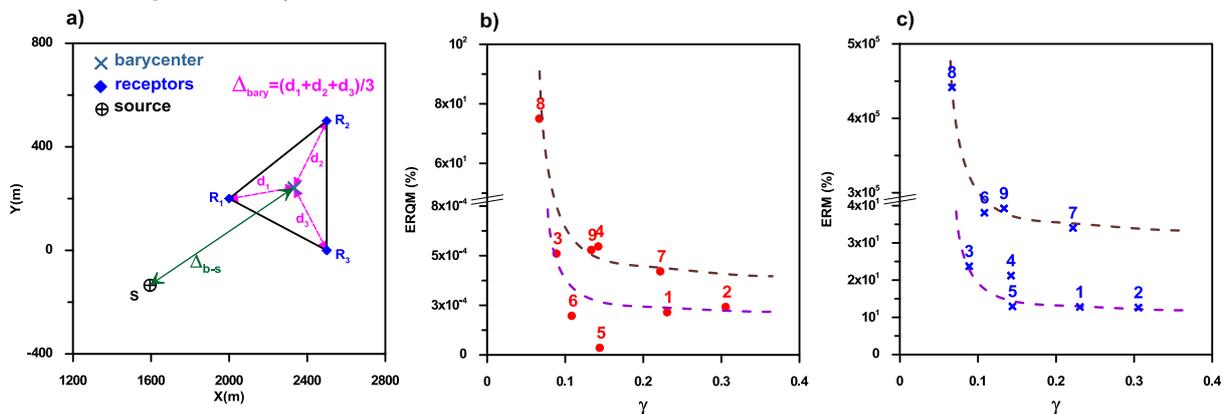


Figure IV.39: Evolutions des erreurs sur la quantité de masse rejetée (*ERQM*) (b) et des erreurs relatives maximales (*ERM*) (c) pour les différentes configurations testées, en fonction du paramètre  $\gamma$ .

### IV.2.5. Application au milieu urbain

Dans cette section, nous profitons des progrès récents dans la modélisation de la dispersion urbaine, en utilisant pour la première fois un modèle opérationnel direct capable de reproduire les effets locaux des écoulements à l'intérieur de la canopée urbaine afin de reconstruire correctement une source de pollution atmosphérique dans des milieux urbains complexes. Pour cela, nous avons couplé le système de modélisation inverse, ReWind, développé pendant ces travaux de recherche avec le modèle opérationnel SIRANE (Soulhac et al., 2012, 2011) pour reconstruire une source de pollution en utilisant des mesures de concentration effectuées en soufflerie sur des configurations idéalisées d'un réseau des rues (Garbero et al., 2010). Ce couplage de l'algorithme inverse avec le modèle de dispersion atmosphérique SIRANE constitue une plateforme spécifique d'inversion qui est apte à reconstruire rapidement les paramètres sources dans des environnements complexes (en particulier les milieux urbains) à l'échelle locale. Nous étudions dans ce paragraphe les performances et les principales limites d'application de cette approche pour reconstruire une seule source de

pollution située dans un réseau des rues. Une étude de sensibilité de l'inversion a été effectuée par rapport aux positions des récepteurs utilisés pour identifier la source de pollution.

#### **IV.2.5.1. Outils d'application de la modélisation inverse**

Comme nous l'avons vu dans la première partie, l'application de la modélisation inverse nécessite obligatoirement d'autres outils indispensables, en plus de l'algorithme inverse, pour assurer une bonne estimation des paramètres. Nous utilisons dans cette étude, des mesures de concentration effectuées en soufflerie comme observations et le modèle SIRANE comme modèle physique direct de dispersion atmosphérique.

##### **IV.2.5.1.1. Observation : Essais de Garbero et al. (2010)**

Les mesures expérimentales utilisées sont celles présentées par Garbero et al. (2010) et réalisées dans la grande soufflerie du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (LMFA) de l'Ecole Centrale de Lyon (ECL). Nous rappelons ici que :

- Le modèle à échelle réduite dans la soufflerie représente un quartier idéalisé d'une ville (Figure IV.40) constitué par des parallélépipèdes de section carrée d'une longueur  $L=250\text{mm}$ , d'une hauteur  $H=50\text{mm}$ . La largeur de la rue  $W$  est égale à  $50\text{mm}$  ce qui représente  $20\text{m}$  dans la réalité en appliquant une échelle  $1:400$ .
- Les simulations expérimentales ont été effectuées en utilisant une source fixe ponctuelle et stationnaire d'un scalaire passif d'éthane, de débit  $Q$ , placée au centre d'une intersection du quartier ( $X=Y=0\text{m}$ ), à mi-hauteur des bâtiments ( $z=H/2$ ).
- Les mesures de concentration ont été réalisées en aval de la source avec un Détecteur par Ionisation de Flamme (FID). Des profils de concentration (moyenne temporelle) ont été effectués le long des rues transversales à l'écoulement au sein et à l'extérieur de la canopée urbaine.
- Ces campagnes de mesure ont été réalisées pour différentes configurations de quartier en faisant varier à chaque fois l'orientation du quartier pour étudier le transport des polluants à l'intérieur et à l'extérieur de la canopée urbaine sous différentes directions du vent incident. Nous avons choisi dans cette étude la direction du vent  $\theta=30^\circ$  (Figure IV.40).

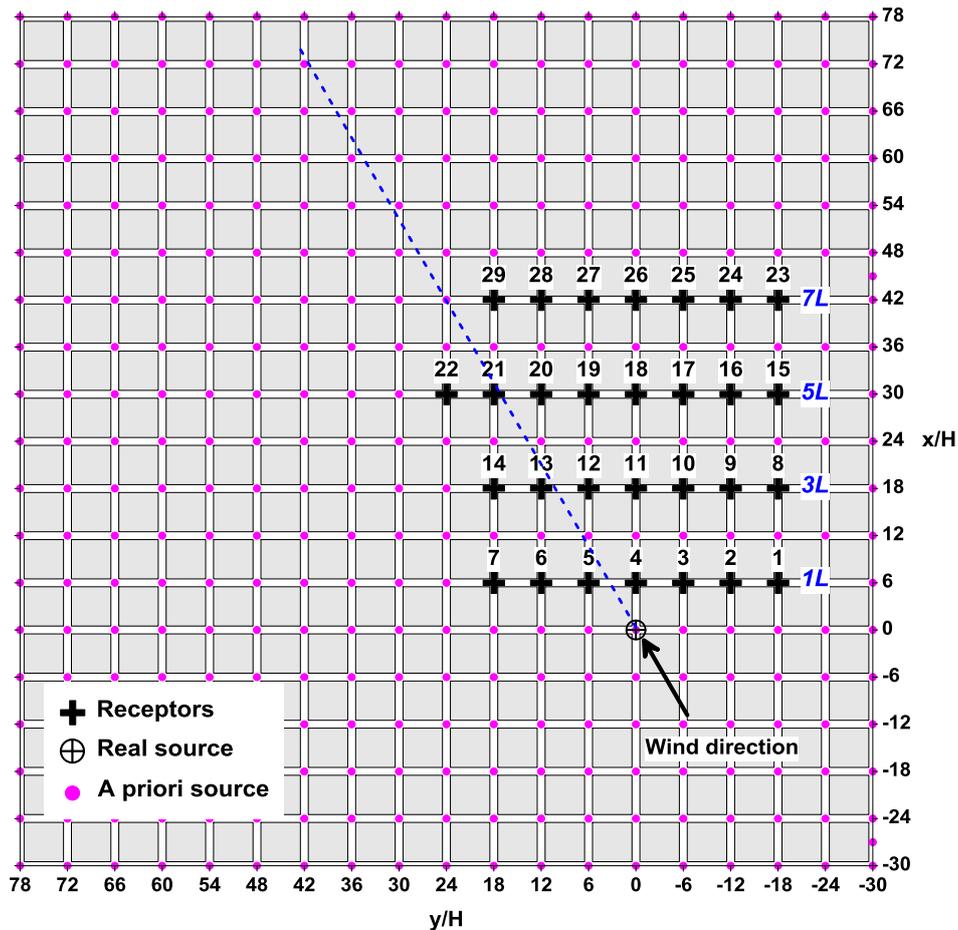


Figure IV.40 : Configuration d'un quartier idéalisé avec une direction du vent incident  $\theta=30^\circ$  par rapport à l'axe des rues : les points en rose représentent les positions a priori de la source, les croix en noir indiquent les positions des récepteurs utilisés dans l'inversion.

#### IV.2.5.1.2. Modèle SIRANE

Le modèle physique de dispersion atmosphérique SIRANE (Soulhac et al., 2011) est un modèle opérationnel capable de reproduire les différents phénomènes physiques et les effets locaux des écoulements dans un réseau de rues. La deuxième partie (II.1) de ce manuscrit présente en détail ce modèle et sa validation avec les mesures expérimentales de Garbero et al. (2010), citées ci-dessus.

Nous rappelons brièvement que :

- Le réseau de rues du quartier de la ville est représenté dans SIRANE comme un entrecroisement de segments.
- L'écoulement de la couche limite sus-jacente est modélisé par la théorie de similitude de Monin-Obukhov et la dispersion traitée par un modèle de type panache Gaussien.
- SIRANE admet trois principaux mécanismes de transport dans la canopée urbaine : transfert turbulent de polluant entre la canopée et la couche limite sus-jacente (Soulhac et al., 2013), canalisation des polluants dans la rue et échanges de polluant aux intersections de rue.
- Le modèle SIRANE fournit des concentrations moyennées spatialement à l'intérieur de chaque rue canyon (segment).

#### IV.2.5.2. Scénarios de base

Pour bien étudier la fiabilité de notre algorithme à reconstruire une source de pollution atmosphérique stationnaire (émission constante et continue) située dans un réseau de rues, nous

avons utilisé plusieurs configurations de récepteurs (Tableau IV.3) qui sont tous placés dans les intersections de rues (Figure IV.40). Les essais d'inversion ont été effectués en utilisant des observations fournies par trois récepteurs ou par sept récepteurs différents, comme indiqué dans le Tableau IV.3. Chaque configuration est composée de récepteurs d'une même rangée (même axe transversal par rapport à la direction du vent) à différentes distance de la source (1L, 3L, 5L et 7L où  $L=120m$ ). L'objectif est donc de retrouver le débit réel de la source et sa position parmi celles indiquées en rose sur la Figure IV.40. Pour limiter le nombre de degrés de liberté du problème, plusieurs paramètres (comme les conditions météorologiques) ont été supposés connus. En effet, nous utilisons des mesures en soufflerie effectuées sous la direction de vent  $\theta=30^\circ$  et pour un rejet de la source stationnaire. Comme pour les émissions instantanées, l'étude des rejets stationnaires a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche (Liping et al., 2013; Roussel et al., 2000; Rudd et al., 2012). Le traitement de ce problème apparait physiquement moins complexe puisque nous n'avons qu'une seule valeur de débit à estimer pour chaque source (dimension faible de problème). Néanmoins, pour un régime stationnaire d'émission, nous ne disposons que d'une seule mesure de concentration stationnaire à chaque récepteur. Donc, bien que les dimensions du système soient assez faibles par rapport aux rejets non stationnaires, sa résolution mathématique n'est pas évidente vu la faible qualité des observations mesurées (nombre des observations ou des contraintes assez réduit).

Configurations		Récepteurs
Avec 3 récepteurs	Configuration 1L-3R	R4, R5 et R6
	Configuration 3L-3R	R11, R12 et R13
	Configuration 5L-3R	R18, R19 et R20
	Configuration 7L-3R	R26, R27 et R29
Avec 7 récepteurs	Configuration 1L-7R	R1, R2, R3, R4, R5, R6 et R7
	Configuration 3L-7R	R8, R9, R10, R11, R12, R13 et R14
	Configuration 5L-7R	R15, R16, R17, R18, R19, R21 et R22
	Configuration 7L-7R	R23, R24, R25, R26, R27, R28 et R29

Tableau IV.3 : Différentes configurations (disposition des récepteurs) utilisées dans l'inversion sur le quartier

### IV.2.5.3. Résultats

L'étude des performances de l'algorithme inverse sur les configurations du quartier idéalisé a été effectuée en comparant les résultats de l'inversion en utilisant soit des observations synthétiques, soit des mesures de concentration en soufflerie. Les résultats d'identification de la position de la source dans le quartier en utilisant les différentes configurations citées ci-dessus sont présentés sur les Figures IV.41 à IV.48, chacune montrant les iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions a priori de la source. Etant donné que les ordres de grandeur de notre critère CR1 sont très variés, nous avons choisi l'échelle logarithme pour bien représenter la variabilité spatiale des valeurs dans le plan ( $X, Y$ ), comme le montre les figures. Une valeur de 0 correspond à 1% et une valeur de 1 correspond à 10%.

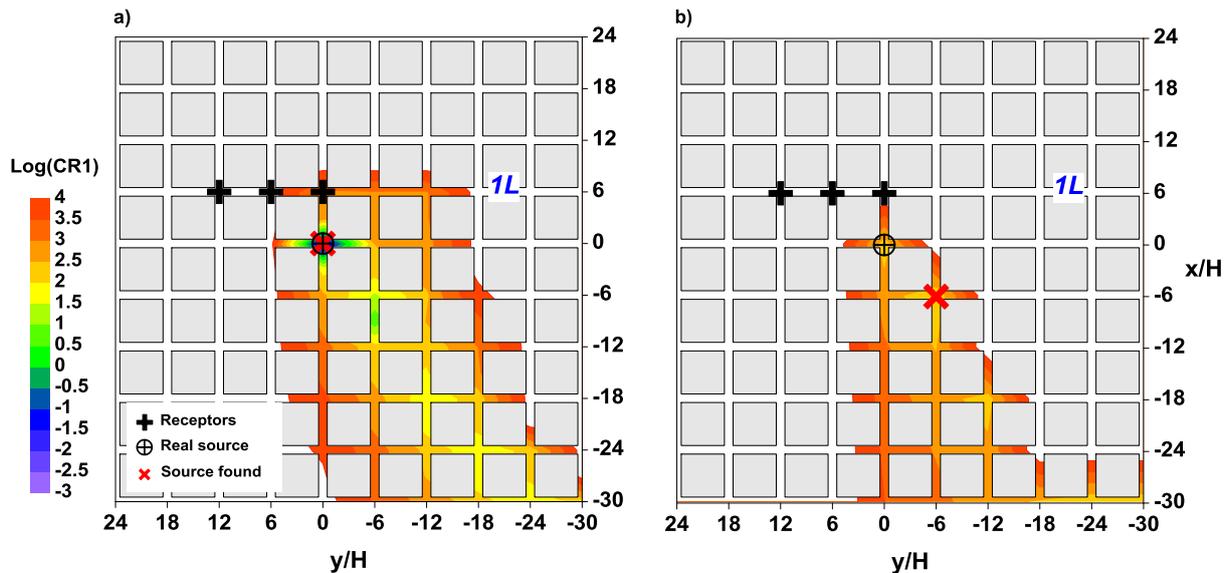


Figure IV.41 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux trois points récepteurs placés dans la 1<sup>ère</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse en utilisant les récepteurs illustrés par les croix noires.

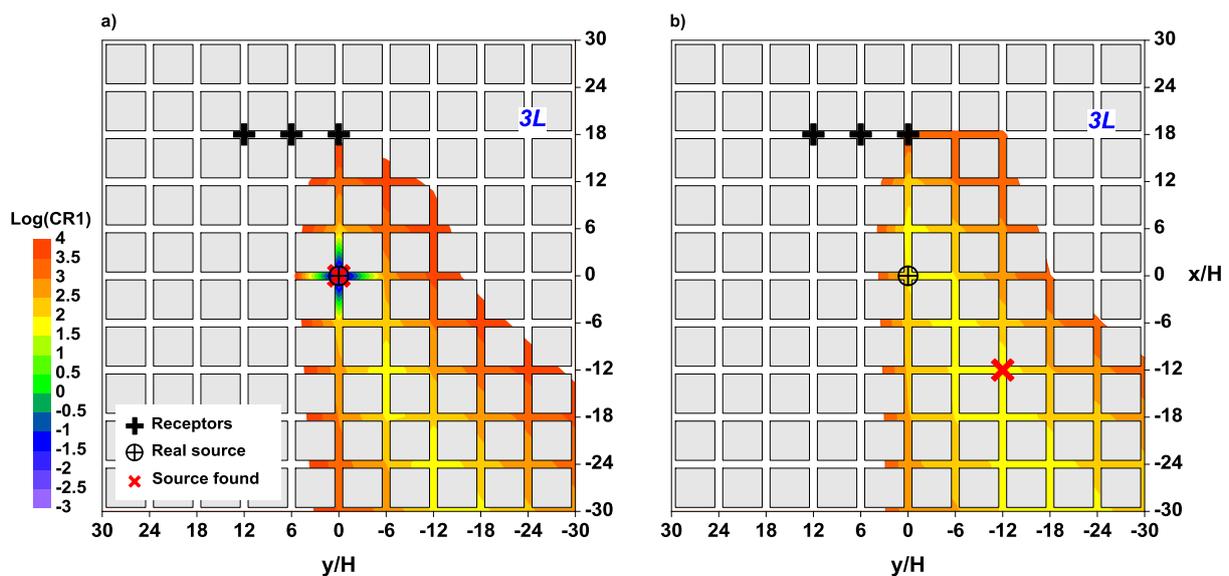


Figure IV.42 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux trois points récepteurs placés dans la 3<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse en utilisant les récepteurs illustrés par les croix noires

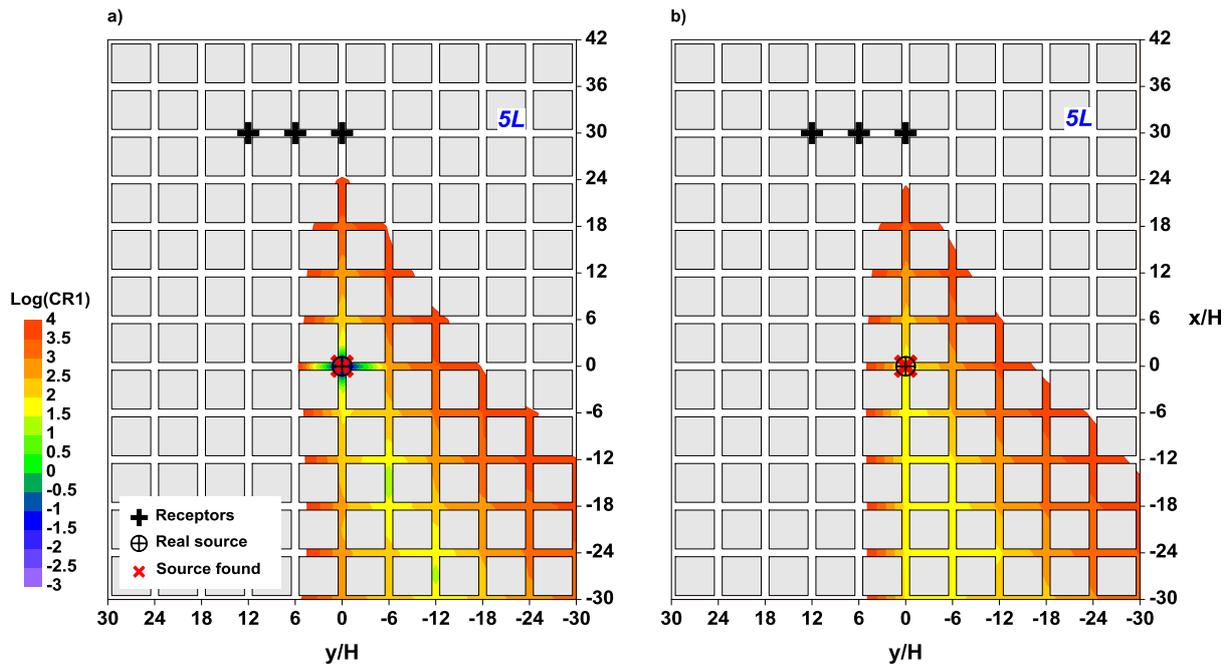


Figure IV.43 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux trois points récepteurs placés dans la 5<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

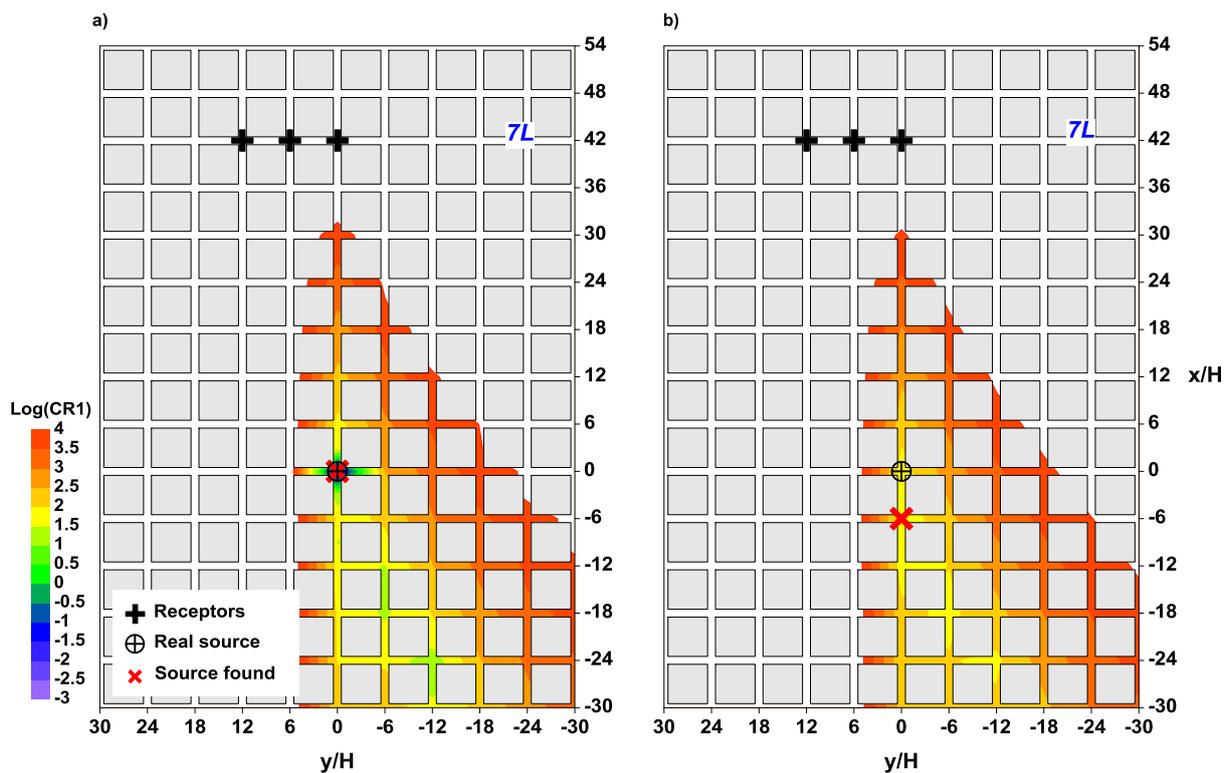


Figure IV.44 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux trois points récepteurs placés dans la 7<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

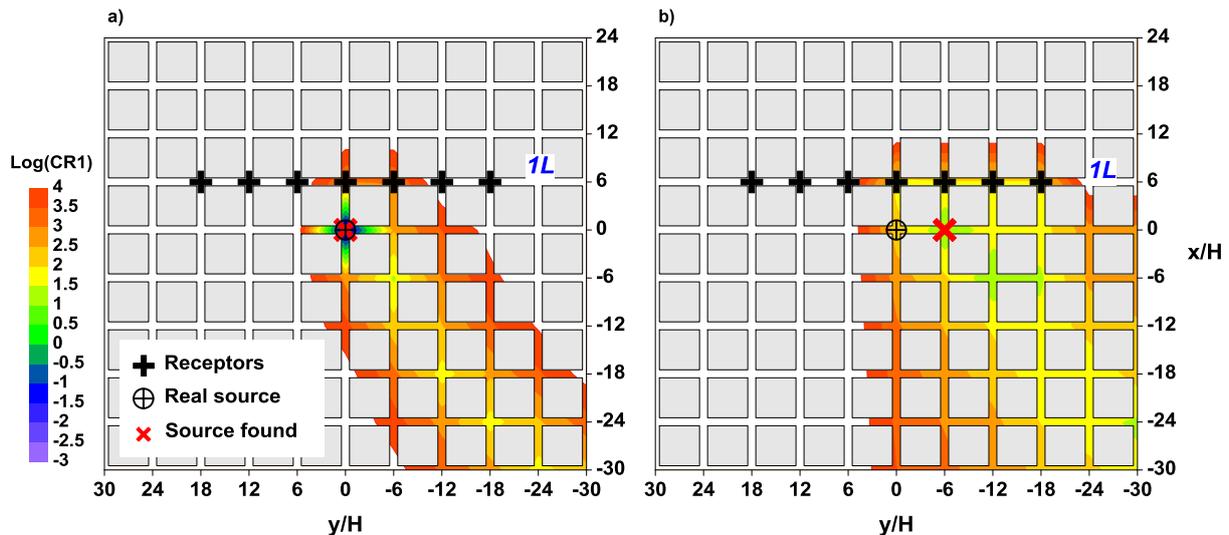


Figure IV.45 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux sept points récepteurs placés dans la 1<sup>ère</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

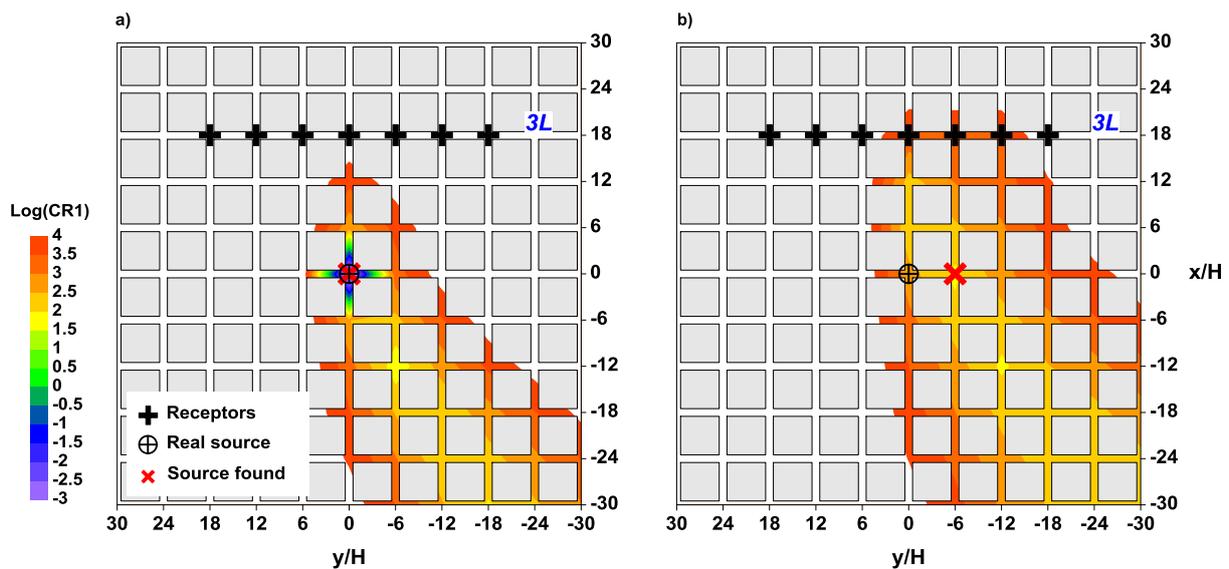


Figure IV.46 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux sept points récepteurs placés dans la 3<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

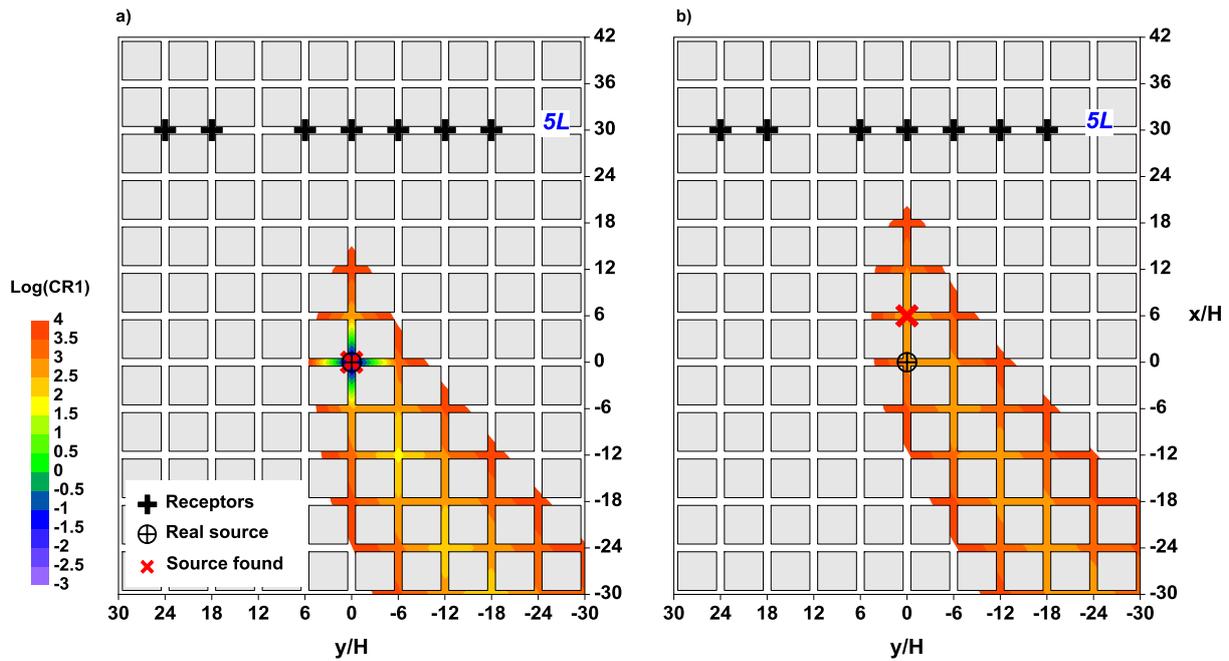


Figure IV.47 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux sept points récepteurs placés dans la 5<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

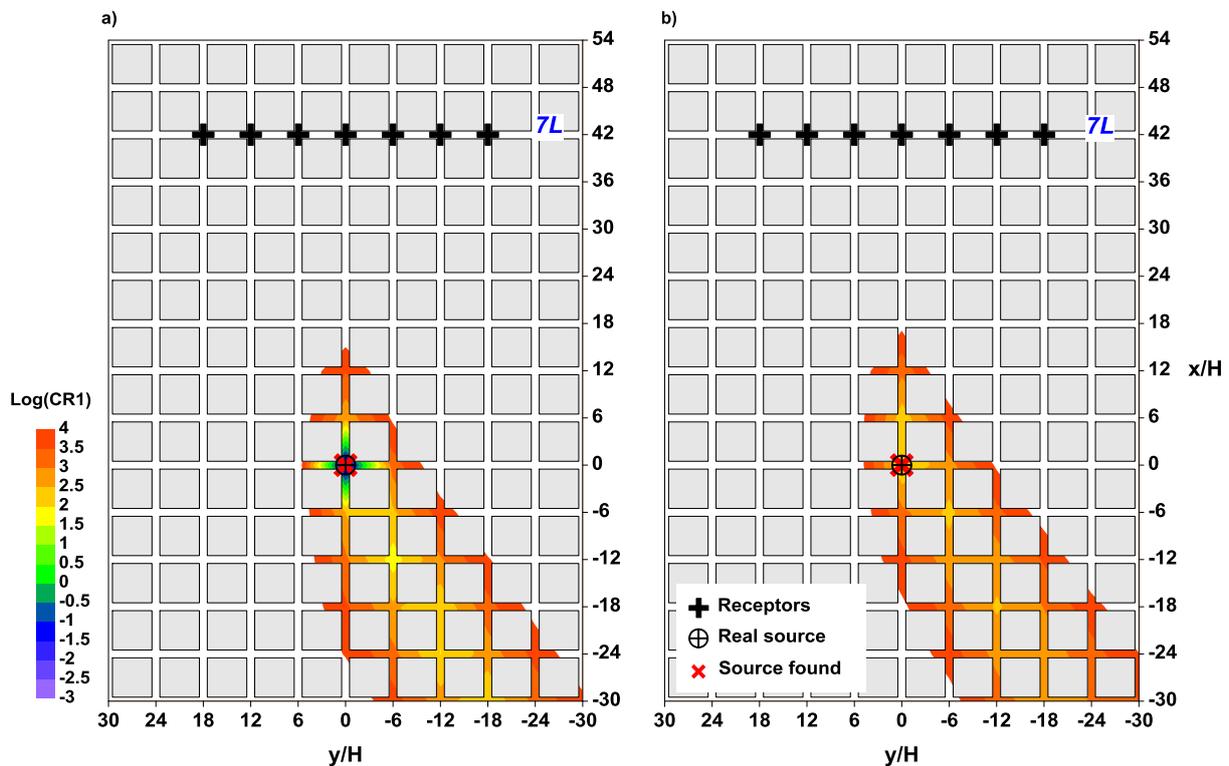


Figure IV.48 : Iso-contours d'évolution de la fonctionnelle à différentes positions possibles de la source en utilisant des observations synthétiques (a) ou des mesures en soufflerie (b) aux sept points récepteurs placés dans la 7<sup>ème</sup> rangée de rues. Les croix rouges indiquent les positions de la source retrouvée par l'algorithme inverse.

Les emplacements des récepteurs utilisés dans l'inversion et les positions retrouvées par le système de modélisation inverse, pour les différentes configurations, ont été illustrés sur les figures respectivement par des croix noires et rouges. L'inversion a été effectuée dans les différents cas, en utilisant à la fois des données d'observations synthétiques (figures à gauche) ou des mesures en soufflerie (figures à droite). Nous observons que l'algorithme inverse retrouve toujours exactement la vraie position de la source lorsqu'on utilise des mesures synthétiques fournies par le modèle direct de dispersion SIRANE. En revanche, les résultats d'inversion sont souvent moins bons en utilisant les mesures expérimentales en soufflerie. La distance entre la vraie position et celle retrouvée par l'algorithme inverse peut atteindre 400 m (Figure IV.42-b) suivant la configuration d'emplacement des récepteurs choisis pour l'inversion. Par exemple, dans 25% des cas (Figure IV.43-b et Figure IV.48-b), nous trouvons correctement la position réelle de la source. Dans 50% des configurations simulées la position trouvée est décalée de 120 m par rapport à la vraie position (Figure IV.44-b, Figure IV.45-b, Figure IV.46-b, Figure IV.47-b) et dans les 25% restant (Figure IV.43-b et Figure IV.48-b) le code inverse identifie une position de source comprise entre 200 m et 400 m par rapport à l'emplacement réel. Ces erreurs du système de modélisation inverse sont principalement liées aux erreurs du modèle direct de dispersion car les résultats d'inversion avec les valeurs synthétiques de concentration (modèle physique supposé parfait) sont tous exacts (dans toutes les figures de gauche).

La performance des résultats de l'inversion en utilisant sept récepteurs est relativement meilleure que celle en utilisant seulement trois récepteurs. On constate en effet que les écarts maximaux sur la position ne dépassent pas 120m (une seule rangée) en utilisant 7 récepteurs simultanément. Ces résultats sont considérés comme assez encourageants puisque le pas spatial minimal de recherche adopté est de 120m.

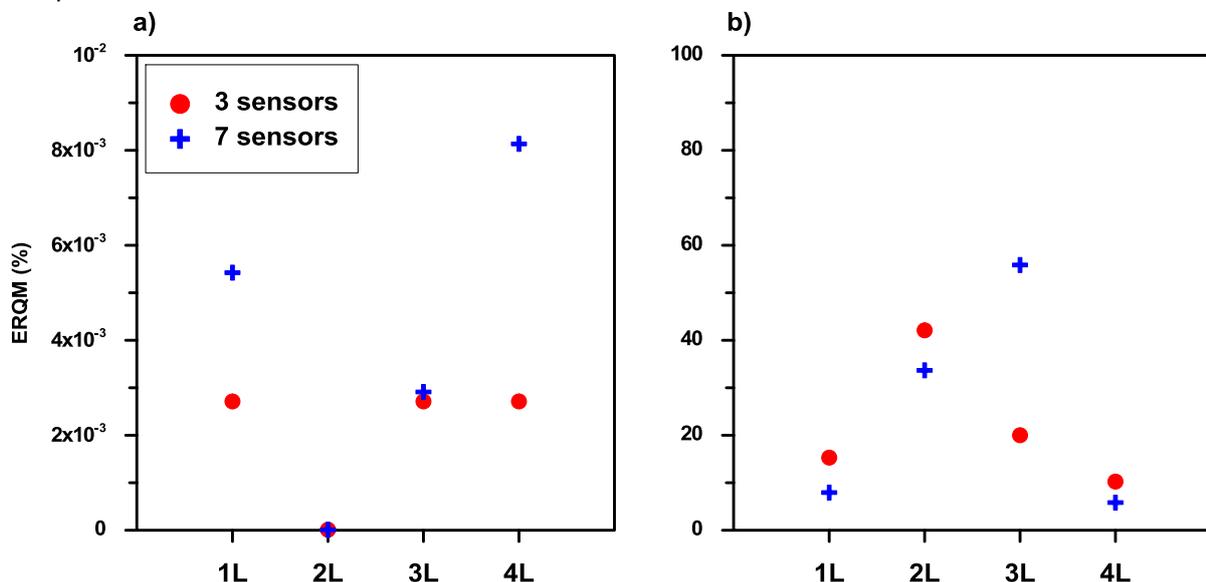


Figure IV.49 : Evolutions des erreurs d'inversion sur le débit pour les différentes distances à la source. (a) inversion en utilisant des observations synthétiques et (b) inversion en utilisant des mesures en soufflerie.

Pour l'évaluation du comportement de la méthode inverse à reproduire les débits d'émission, nous présentons sur la Figure IV.49 l'évolution de l'erreur d'estimation pour les meilleures positions de source retrouvées pour chaque configuration, en utilisant des observations synthétiques (Figure IV.49-a) ou des mesures en soufflerie (Figure IV.49-b). Nous constatons que

l'utilisation d'un modèle de dispersion parfait (observations synthétiques) permet de retrouver le débit réel avec une erreur très faible. Nous remarquons pour les cas d'utilisation de valeurs synthétiques, que la qualité des résultats est moins bonne avec 7 récepteurs. Cela peut s'expliquer par le fait que le nombre de récepteurs impactés par le panache de pollution est plus important et que nous avons alors plus de contraintes à satisfaire avec notre algorithme. Cependant, dans des situations réelles ou en utilisant des mesures expérimentales, l'ajout des récepteurs améliore souvent la qualité des résultats comme le montre la Figure IV.49-b.

Bien que les erreurs d'inversion puissent atteindre 60% dans certains cas (Figure IV.49-b), les résultats de la méthode inverse adoptée dans ce travail sont considérés globalement comme assez satisfaisants pour identifier la position et l'ordre de grandeur du débit de la source. D'autres tests seront bien évidemment à réaliser pour bien évaluer les performances de ce méta-algorithme.

## IV.2.6. Conclusions

Nous avons présenté au début de ce chapitre la philosophie de notre méta-algorithme d'identification du terme source. Cette méthode nous permet de déterminer à la fois la position et le débit d'une source de pollution atmosphérique.

Ensuite, nous avons présenté une étude d'évaluation de sa fiabilité en utilisant trois fonctionnelles différentes. Nous avons montré que malgré certaines limites d'application dans des situations réelles, les trois fonctions coût permettent de remonter au débit d'émission et à la position de la source. Les tests d'inversion effectués en utilisant ces critères d'arrêt montrent que les critères globaux (calculés sur la totalité de la masse rejetée) sont plus faciles à appliquer dans les algorithmes numériques. Par contre, ils ne peuvent pas retrouver la fréquence et la forme chronique du débit. Par ailleurs, les critères locaux capables d'identifier à la fois la position et la forme du débit ne sont pas pratiques pour des applications réelles. En effet leur mise en œuvre numérique est assez coûteuse et leurs solutions sont assez locales.

Nous avons étudié également la performance de notre méthode inverse à reproduire le débit et la position de la source en fonction de la position des récepteurs en utilisant des observations synthétiques. Ces essais de simulation ont été effectués à l'échelle locale dans un écoulement instationnaire simulé dans la couche limite atmosphérique en utilisant le modèle SIRANERISK. Nous avons constaté que la fiabilité des résultats d'inversion est assez sensible aux emplacements des récepteurs.

Enfin, pour bien étudier le comportement de notre méthode inverse dans des situations réelles à l'échelle locale, nous avons effectué des essais d'inversion sur des configurations urbaines complexes en utilisant à la fois des observations synthétiques et des mesures effectuées en soufflerie. Cette étude a été effectuée en utilisant le modèle direct de dispersion atmosphérique SIRANE. Nous avons remarqué que les résultats de la modélisation inverse sont fortement sensibles à la qualité de prédiction du modèle direct SIRANE. De même, nous avons constaté que l'algorithme retrouve correctement la position et le débit de la source lorsqu'il y a suffisamment de récepteurs impactés par le panache de polluant.

## IV.2.7. Références

- Akçelik, V., Biros, G., Ghattas, O., Long, K.R., Waanders, B. van B., 2003. A variational finite element method for source inversion for convective–diffusive transport. *Finite Elem. Anal. Des.* 39, 683–705.
- Brereton, C.A., Johnson, M.R., 2012. Identifying sources of fugitive emissions in industrial facilities using trajectory statistical methods. *Atmos. Environ.* 51, 46–55.

- Bronner, C., Dandrieux, A., Chapelain, J., Fontaine, F., Dusserre, G., 2008. Utilisation des algorithmes génétiques pour l'évaluation du terme source. Application aux phénomènes d'explosion. 16ème congrès de maîtrise des risques et de sûreté de fonctionnement. Avignon 6-10 octobre 2008.
- Calori, G., Finzi, G., Tonezzer, C., 1994. A decision support system for air quality network design. *Environ. Monit. Assess.* 33, 101–114.
- Chang, M.E., Hartley, D.E., Cardelino, C., Haas-Laursen, D., Chang, W.-L., 1997. On using inverse methods for resolving emissions with large spatial inhomogeneities. *J. Geophys. Res. Atmospheres* 102, 16023–16036.
- Delle Monache, L., Lundquist, J.K., Kosović, B., Johannesson, G., Dyer, K.M., Aines, R.D., Chow, F.K., Belles, R.D., Hanley, W.G., Larsen, S.C., Loosmore, G.A., Nitao, J.J., Sugiyama, G.A., Vogt, P.J., 2008. Bayesian Inference and Markov Chain Monte Carlo Sampling to Reconstruct a Contaminant Source on a Continental Scale. *J. Appl. Meteorol. Climatol.* 47, 2600–2613.
- Garbero, V., Salizzoni, P., Soulhac, L., 2010. Experimental Study of Pollutant Dispersion Within a Network of Streets. *Bound.-Layer Meteorol.* 136, 457–487. doi:10.1007/s10546-010-9511-2
- Haupt, S.E., 2005. A demonstration of coupled receptor/dispersion modeling with a genetic algorithm. *Atmos. Environ.* 39, 7181–7189.
- Karabelas, A., Sarigiannis, D., 2008. Satellite-assisted management of air quality: Optimal air pollution monitoring network configuration (No. LIFE05 ENV/GR/000214). Centre for research & technology hellas (CERTH).
- Keats, A., Yee, E., Lien, F.-S., 2007. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment. *Atmos. Environ.* 41, 465–479.
- Khlaifi, A., Ionescu, A., Candau, Y., 2009. Pollution source identification using a coupled diffusion model with a genetic algorithm. *Math. Comput. Simul.* 79, 3500–3510.
- Krysta, M., Bocquet, M., Sportisse, B., Isnard, O., 2006. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data. *Atmos. Environ.* 40, 7267–7279.
- Krysta, M., Bocquet, M., 2007. Source reconstruction of an accidental radionuclide release at European scale. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 133, 529–544.
- Liping, P., Yu, Z., Hongquan, Q., Tao, H., Wei, W., 2013. Approach to identifying pollutant source and matching flow field. *Atmos. Environ.* 73, 1–10.
- Liu, X., Zhai, Z., 2007. Inverse modeling methods for indoor airborne pollutant tracking: literature review and fundamentals: Indoor airborne pollutant tracking. *Indoor Air* 17, 419–438.
- Matthes, J., Gröll, L., Keller, H.B., 2004. Source localization based on pointwise concentration measurements. *Sens. Actuators Phys.* 115, 32–37.
- McGrail, B.P., 2001. Inverse reactive transport simulator (INVERTS): an inverse model for contaminant transport with nonlinear adsorption and source terms. *Environ. Model. Softw.* 16, 711–723.
- Müller, J.-F., Stavrakou, T., 2005. Inversion of CO and NO<sub>x</sub> emissions using the adjoint of the IMAGES model. *Atmospheric Chem. Phys.* 5, 1157–1186.
- Munn, R.E., 1981. *The Design of Air Quality Monitoring Networks*. MacMillan.
- Politis, K., Robertson, L., 2004. Bayesian updating of atmospheric dispersion after a nuclear accident. *J. R. Stat. Soc. Ser. C Appl. Stat.* 53, 583–600.
- Pudykiewicz, J.A., 1998. Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters. *Atmos. Environ.* 32, 3039–3050.
- Quélo, D., Sportisse, B., Isnard, O., 2005. Data assimilation for short range atmospheric dispersion of radionuclides: a case study of second-order sensitivity. *J. Environ. Radioact.* 84, 393–408.
- Robertson, L., 2004. Extended back-trajectories by means of adjoint equations. Report RMK No.105, Swedish Meteorological and Hydrological Institute. (InteractiveResource No. N°105).
- Robertson, L., Langner, J., 1998. Source function estimate by means of variational data assimilation applied to the ETEX-I tracer experiment. *Atmos. Environ.* 32, 4219–4225.
- Roussel, G., Delmaire, G., Ternisien, E., Lherbier, R., 2000. Separation problem of industrial particles emissions using a stationary scattering model. *Environ. Model. Softw.* 15, 653–661.

- 
- Roussel, G., Ternisien, E., Benjelloun, M., 2002. Estimation d'un modèle stationnaire de dispersion et localisation de source. Application à la surveillance de la pollution. *TS Trait. Signal* 19, 37–48.
- Rudd, A.C., Robins, A.G., Lepley, J.J., Belcher, S.E., 2012. An Inverse Method for Determining Source Characteristics for Emergency Response Applications. *Bound.-Layer Meteorol.* 144, 1–20.
- Senocak, I., Hengartner, N.W., Short, M.B., Daniel, W.B., 2008. Stochastic event reconstruction of atmospheric contaminant dispersion using Bayesian inference. *Atmos. Environ.* 42, 7718–7727.
- Sharan, M., Singh, S.K., Issartel, J.P., 2012. Least Square Data Assimilation for Identification of the Point Source Emissions. *Pure Appl. Geophys.* 169, 483–497.
- Skiba, Y.N., 2003. On a method of detecting the industrial plants which violate prescribed emission rates. *Ecol. Model.* 159, 125–132.
- Sohn, M.D., Reynolds, P., Singh, N., Gadgil, A.J., 2002. Rapidly Locating and Characterizing Pollutant Releases in Buildings. *J. Air Waste Manag. Assoc.* 52, 1422–1432.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X., Perkins, R., 2011. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part I, presentation of the model. *Atmos. Environ.* 45, 7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D., Rios, I., 2012. The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion; Part II, validation of the model on a real case study. *Atmos. Environ.* 49, 320–337.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Perkins, R.J., 2013. Parametric laws to model urban pollutant dispersion with a street network approach. *Atmos. Environ.* 67, 229–241.
- Thomson, L.C., Hirst, B., Gibson, G., Gillespie, S., Jonathan, P., Skeldon, K.D., Padgett, M.J., 2007. An improved algorithm for locating a gas source using inverse methods. *Atmos. Environ.* 41, 1128–1134.
- Vautard, R., Beekmann, M., Menut, L., 2000. Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling. *Environ. Model. Softw.* 15, 703–709.
- Yee, E., Lien, F.-S., Keats, A., D'Amours, R., 2008. Bayesian inversion of concentration data: Source reconstruction in the adjoint representation of atmospheric diffusion. *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 96, 1805–1816.

---

# Conclusions et perspectives

---

## Conclusions

L'étude de la modélisation directe et inverse de la dispersion atmosphérique dans des milieux complexes (industriels ou urbains) est devenu sur ces dernières décennies un sujet prometteur de recherche environnementale dans la mesure où elle permet d'informer les autorités et les riverains sur la qualité de l'air et de mieux gérer les situations de crises (accidents, incendies, attentats,...). La modélisation directe de la dispersion atmosphérique consiste à utiliser des logiciels de simulation numérique (de concepts différents) pour décrire la variabilité spatio-temporelle des polluants dans l'atmosphère en utilisant comme données d'entrée la topographie du site, les conditions météorologiques et les caractéristiques du rejet. Cependant, la qualité des résultats de ces modèles directs est fortement dépendante des paramètres des sources (positions, débit) qui ne sont pas toujours bien définis et qui sont souvent difficiles à mesurer directement dans les situations réelles. Par exemple dans une zone industrielle, il est très difficile d'estimer les émissions non canalisées comme celles associées à des fuites non maîtrisées, à l'évaporation de surfaces liquides (stockage d'hydrocarbures) ou solide (sols pollués) et à des échanges par ventilation entre l'intérieur et l'extérieur d'un bâtiment (portes, fenêtres, lanterneaux, etc.). La mise en place de la modélisation inverse pour identifier le terme source en utilisant des mesures de concentration devient également de plus en plus intéressante pour améliorer le fonctionnement des systèmes d'intervention dans les situations urgentes. En effet, une bonne connaissance de la source nous permet de prendre les meilleures décisions de gestion des situations de crise en temps réel.

Au cours de ce travail de thèse, nous avons développé une méthode inverse hybride capable de reconstruire le terme source dans des configurations assez complexes. Dans ce contexte, nous nous sommes principalement intéressés à l'application de la modélisation inverse aux échelles locales en présence d'obstacles. Il s'agissait d'identifier des émissions de courte durée dans des conditions de turbulence relativement importante produites par des écoulements de couche limite atmosphérique ou par des configurations complexes de quartiers urbains.

Pour garantir de bons résultats d'inversion, nous avons commencé notre étude par la validation des modèles directs de dispersion atmosphérique mis en œuvre dans l'application inverse. Les données expérimentales utilisées pour cela étaient des mesures réalisées dans la soufflerie du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon, pour différentes configurations. Dans ce contexte et après avoir présenté la spécificité de nos modèles physiques de dispersion atmosphérique (SIRANE et SIRANERISK), une étude de sensibilité détaillée a été réalisée. Cette analyse a permis d'évaluer les performances des modèles par rapport aux paramétrages adoptés pour simuler les échanges verticaux entre la canopée et l'atmosphère sus-jacente, les transferts aux intersections de rues et la canalisation des écoulements à l'intérieur de la canopée urbaine. Nous

avons confirmé, dans cette partie, que nos modèles directs de dispersion atmosphérique permettaient bien de reproduire correctement les effets locaux d'écoulement dans des milieux à forte densité d'obstacles. De même, nous avons montré que les effets du cisaillement du vent sont relativement importants dans le cas des rejets instantanés et nous avons proposé et validé une paramétrisation pour les prendre en compte dans le modèle SIRANERISK.

Dans la troisième partie, nous avons présenté la philosophie générale de la méthode inverse que nous avons développée dans cette étude et qui permet de reconstruire le débit d'une source de pollution atmosphérique en profitant de la linéarité qui relie les observations au vecteur d'émission. Il s'agit d'une approche fondée principalement sur la résolution d'un système de types moindres carrés par plusieurs méthodes d'optimisation adaptées pour traiter les différents types de problème. Dans ce cadre, une étude de sensibilité détaillée a été effectuée avec des observations synthétiques pour identifier les limites d'application de notre algorithme dans la pratique, en supposant que la position de la source est connue. Nous avons montré par cette analyse que notre algorithme était fortement sensible à plusieurs paramètres d'entrée tels que les conditions météorologiques, la qualité des observations et les positions des récepteurs par rapport à la source.

Enfin, la quatrième et dernière partie de ce manuscrit était consacrée à étudier la fiabilité et la performance de notre système de modélisation inverse pour reproduire les paramètres de la source en utilisant des mesures expérimentales effectuées en soufflerie. Dans le premier chapitre, nous avons testé la fiabilité de notre approche pour estimer les émissions rejetées instantanément par une source dans une couche limite turbulente et dans un quartier idéalisé. Nous avons dans un premier temps discuté de la fiabilité de notre algorithme, utilisant une méthode de régularisation de Tikhonov, pour reproduire les débits d'émission à l'échelle locale, en utilisant des signaux instantanés et des moyennes d'ensemble de concentration. Dans cette section, nous avons montré que les résultats de l'inversion sont globalement satisfaisants voire assez encourageants en termes de reproduction de la quantité de masse totale rejetée dans l'atmosphère, qui constitue une information importante pour gérer les situations de crise. En effet, la fiabilité des résultats sur la quantité totale de polluants rejetée est souvent plus importante que la recherche de l'allure des signaux temporels de débit. En revanche, nous avons constaté que même l'utilisation de méthodes de régularisation ne permet pas de retrouver correctement l'évolution temporelle des émissions en utilisant des signaux instantanés de concentration. Dans un deuxième temps, nous avons effectué une comparaison entre quatre méthodes différentes d'estimation des paramètres de régularisation afin d'appliquer correctement la méthode de Tikhonov. Il apparaît que la méthode de recherche du maximum de courbure de la L-curve constitue la méthode la plus satisfaisante pour optimiser les différents critères sur la qualité du résultat de l'inversion.

Dans le deuxième chapitre de cette dernière partie, nous avons présenté un méta-algorithme développé pour identifier la position d'une source de pollution atmosphérique inconnue à l'échelle locale. Après la présentation de la philosophie générale de cette méthode de recherche itérative, nous avons discuté le choix du critère d'arrêt le plus convenable pour ce type de problème dans des situations pratiques. Ces critères ont été testés sur des situations fictives de recherche en utilisant l'algorithme inverse présenté dans le chapitre précédent et les mesures synthétiques fournies par le modèle de dispersion atmosphérique SIRANERISK. Ensuite, après avoir étudié la sensibilité de cet algorithme à retrouver le débit et la position de la source aux emplacements des récepteurs, nous avons appliqué cette approche sur des situations complexes à l'échelle locale en utilisant des mesures de concentration en soufflerie et des observations synthétiques produites par le modèle direct de dispersion atmosphérique. Nous avons montré dans cette section que le choix de la

fonction coût utilisée pour sélectionner la meilleure solution est assez important pour la performance de la méthode inverse et sa fiabilité. En effet, les tests d'inversion effectués en utilisant ces critères d'arrêt montrent que les fonctionnelles portant sur la quantité totale rejetée étaient plus faciles à intégrer dans les algorithmes numériques. En revanche, elles ne permettent pas de retrouver la fréquence et l'évolution temporelle du débit. Par ailleurs, les critères locaux capables d'identifier à la fois la position et l'évolution du débit se sont avérés peu pratiques pour des applications réelles. En effet leur mise en œuvre numérique est assez coûteuse et leurs solutions sont assez locales. De plus, nous avons montré, à travers une étude de sensibilité sur la disposition des points de mesure, que la performance de notre méta-algorithme était assez variable selon l'emplacement des récepteurs. Enfin, la dernière application de cette approche, sur des configurations complexes en utilisant des mesures en soufflerie, a confirmé que la fiabilité des résultats de l'inversion était fortement sensible à la qualité de prédiction du modèle physique de dispersion.

## Perspectives

Plusieurs autres pistes de recherche sont encore abordables soit pour améliorer la fiabilité des modèles physiques de dispersion atmosphérique soit pour la mise en place de la modélisation inverse pour des applications dans des milieux complexes en présence d'obstacles.

### - **Modélisation directe de la dispersion atmosphérique dans des milieux complexes**

Les résultats présentés dans le premier chapitre de la deuxième partie, concernant l'évaluation de la fiabilité du modèle opérationnel SIRANE par rapport à son paramétrage standard, suggèrent la nécessité d'une autre étude plus approfondie pour mieux éclairer l'impact des variations locales des vitesses d'échange. En effet, des travaux de modélisation et des tests de sensibilité sont envisageables pour améliorer le comportement global du modèle SIRANE en tenant compte des modifications locales de la vitesse d'échange en fonction de l'angle entre la direction du vent et l'axe de chaque rue, plutôt que d'utiliser une valeur uniforme pour l'ensemble du quartier.

Par ailleurs, des travaux de recherche complémentaires sont à mener pour améliorer la description de la variabilité turbulente de la concentration en milieu urbain complexe, en situation de rejet continu ou instantané. Il n'existe pas aujourd'hui d'approche de modélisation de la fonction densité de probabilité des fluctuations de concentration, applicable en présence d'obstacles complexes et dans des temps de calcul compatibles avec les simulations opérationnelles pour des études de scénarios ou de la gestion de crise. La limitation actuelle des modèles opérationnels à la simulation de la moyenne d'ensemble ne permet pas de décrire l'amplitude des valeurs de concentration susceptibles d'être observées, ce qui constitue une limite pour la modélisation directe et pour la modélisation inverse.

Enfin, diverses améliorations des modèles sont à envisager pour prendre en compte des processus physiques plus complexes, associés aux caractéristiques des rejets. On peut citer en particulier la prise en compte des effets de flottabilité (effets thermiques ou de densité), le traitement des rejets à une vitesse très élevée (jet associé à une fuite de réservoir à haute pression) ou encore les changements de phase en situation de rejet liquide.

### - **Application de la modélisation inverse à l'échelle locale**

Bien que l'approche inverse développée dans cette étude ait montré qu'elle était capable d'apporter des réponses concrètes à la problématique de la recherche du débit et de la position d'une source de polluant, d'autres études plus détaillées restent encore nécessaires pour bien

---

caractériser les limites d'application de l'approche proposée dans des cas réels. En particulier, il sera intéressant de poursuivre les travaux pour évaluer la fiabilité de la méthode à reproduire des rejets instantanés de courte durée et déterminer la position de la source dans des milieux complexes et en utilisant des signaux instantanés de concentration.

A moyen terme, d'autres techniques d'inversion telles que les techniques d'assimilation de données, la méthode bayésienne,... pourront être intégrées à notre algorithme inverse pour le rendre plus générique et capable de résoudre d'autre formulation du même problème. Dans ce contexte, une étude de comparaison en termes de fiabilité des résultats et de rapidité de résolution pourrait être réalisée afin d'évaluer ces approches et de trouver le meilleur compromis entre la fiabilité et le coût de calcul. En effet, la mise en œuvre de la méthode inverse reste plus ou moins lourde en temps de calcul et n'est pas parfaitement opérationnelle pour gérer des situations en temps réel.

D'autres pistes de développement seront également à envisager pour traiter des problèmes plus complexes comme l'identification de plusieurs sources de nombre connu, voire inconnu. En effet, la philosophie de notre méta-algorithme de recherche de position, proposé dans ces travaux, ne permet pas actuellement d'identifier plusieurs sources à la fois.

