

# ***Polyphemus* : une plate-forme multimodèles pour la pollution atmosphérique et l'évaluation des risques**

## ***Polyphemus*: a multimodelling platform for atmospheric pollution and risk assessment**

Vivien MALLET\*, Denis QUÉLO, Bruno SPORTISSE\*\*, Irène KORSAKISSOK

### Résumé

Cet article présente le système de modélisation de la qualité de l'air *Polyphemus*, ses principales fonctionnalités et quelques applications. *Polyphemus* est dédié à la modélisation de la dispersion atmosphérique de traceurs passifs ou d'espèces réactives aux échelles locale, régionale et continentale. *Polyphemus* est développé au CEREAA, laboratoire commun entre EDF R&D et l'École des Ponts et au sein d'un projet commun avec l'Institut national de recherche en informatique et automatique (INRIA), avec le soutien de l'IRSN et de l'INERIS.

*Polyphemus* est un système d'un type nouveau qui se distingue de l'approche classique du « modèle tout en un » par sa construction modulaire, notamment fondée sur des bibliothèques et des pilotes manipulant les modèles de dispersion. Accueillant plusieurs modèles, *Polyphemus* est une plate-forme et non un modèle. Une de ses fonctionnalités notables est sa capacité à effectuer des simulations multimodèles, ce qui permet d'évaluer des incertitudes. Plusieurs méthodes d'assimilation de données font aussi partie du système afin de pouvoir intégrer des données fournies par des réseaux de mesure.

### Mots clés

*Polyphemus*. Plate-forme. Pollution atmosphérique. Simulations multimodèles.

### Abstract

This article presents the modelling system *Polyphemus*, its abilities and some applications. *Polyphemus* aims at modelling atmospheric dispersion of passive and reactive tracers at local, regional and continental scales. It is developed at CEREAA, Joint Laboratory between EDF R&D and *École des Ponts* and at CLIME Project from INRIA (the French Institute for Computer Science) with support from IRSN (Institute for Radiological Safety and Nuclear Protection) and INERIS (Institute for Environmental and Industrial Risk).

*Polyphemus* is a modelling system of a new type: it is not an "all in one" model but a fully modular platform based on libraries and drivers to handle the dispersion models. *Polyphemus* can also host several models. A noteworthy characteristic of *Polyphemus* is its ability to run multimodel simulations in order to evaluate uncertainties. In addition, the system includes several data assimilation methods that allow to couple models and measured data provided by monitoring networks.

### Keywords

*Polyphemus*. Platform. Atmospheric pollution. Multimodel simulations.

## 1. Introduction

La modélisation dans le domaine de la dispersion atmosphérique, en particulier en qualité de l'air, a atteint un stade de maturité qui permet d'aller plus loin dans l'utilisation des modèles. Un exemple typique est l'évaluation des incertitudes, que ce soit par analyse des résultats de plusieurs modèles (prévision d'ensemble multimodèles) ou par propagation des incertitudes dans les données d'entrée (émissions, paramètres phy-

siques, etc.) jusqu'aux sorties des modèles (simulations Monte-Carlo). De telles approches sont essentielles pour la modélisation des « risques atmosphériques » (par exemple, suite à un accident sur une installation industrielle), les modèles étant utilisés de manière directe dans l'aide à la décision, mais avec de nombreuses incertitudes. La donne est, sur ce plan, similaire pour le support à la définition de la réglementation sur la qualité de l'air (plafonnement d'émissions au niveau européen, processus *Clean Air For Europe*).

\* INRIA – BP 105 – 78153 Le Chesnay Cedex – E-mail : vivien.mallet@inria.fr

\*\* Centre d'enseignement et de recherche en environnement atmosphérique (CEREAA).

Le système de modélisation *Polyphemus* a été construit dans un tel contexte, ses objectifs étant :

- de disposer d'une plate-forme pouvant travailler à plusieurs échelles (du local au continental) et pour plusieurs applications (de l'étude d'impact à la prévision, du transport passif à la dynamique des aérosols) ;
- de pouvoir piloter des modèles pour des utilisations de haut niveau (prévision d'ensemble, simulations Monte-Carlo, assimilation de données, intégration de modèles) ;
- de favoriser des développements communs à plusieurs modèles et plusieurs applications, *via* le recours à des bibliothèques de prétraitement et de paramétrisations, et de favoriser l'accueil de plusieurs modèles au sein d'une plate-forme.

*Polyphemus* est un système de modélisation orienté vers la modularité. Il repose sur des *bibliothèques*, indépendantes de modèles spécifiques, et sur des *modules numériques et algorithmiques*, eux aussi indépendants des modèles. L'architecture du système permet de dépasser la conception des modèles « tout en un ». Dans le cadre notamment du projet CLIME de l'INRIA, un important effort en génie logiciel a été fourni, ce qui a permis de systématiser la généralité et l'évolutivité des développements de *Polyphemus* en utilisant par exemple des langages objet (C++ et Python). En ce sens, *Polyphemus* ne doit pas être vu comme un « concurrent » d'un modèle : il s'agit d'une boîte à outils qui permet de partager les développements communs entre les modèles (prétraitement, post-traitement, paramétrisations physiques, schémas numériques, algorithmes mathématiques) et son cadre est assez souple pour pouvoir accueillir des modèles (au sens classique du terme) existants.

Au-delà de son utilisation à des fins de recherche, *Polyphemus* a été développé pour répondre aux besoins d'EDF en termes d'étude d'impact et d'étude de scénario d'émission. Pour ce qui concerne la prévision opérationnelle, *Polyphemus* est un des supports du futur outil de prévision du Centre technique de crise de l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN/CTC) et fait l'objet, pour ses fonctionnalités petite échelle, d'un projet en cours avec l'INERIS/CASU (Cellule d'appui aux situations d'urgence). Il est également en test opérationnel sur la plate-forme Prév'air de modélisation photochimique depuis juillet 2006.

Le système a été mis en œuvre à l'échelle continentale en Europe et en Asie (exercice d'intercomparaison MICS-Asia), à l'échelle régionale (Lille, Paris, Marseille, Tokyo, Pologne) et ce pour plusieurs types de pollution (ozone, aérosols, mercure, métaux lourds, radionucléides). Il a notamment permis à l'IRSN d'effectuer la resimulation de l'accident de Tchernobyl en 2006.

À petite échelle, le système met en œuvre des modèles gaussiens stationnaire et à bouffées, dans le cadre de partenariats avec la DGA et l'INERIS.

Sur le plan des processus physiques pris en compte, les modèles d'aérosols de *Polyphemus* (au nombre de deux : MAM et SIREAM) ont été développés dans le cadre du projet Pollution atmosphérique multiphasique (PAM), soutenu par le programme PRIMEQUAL-PREDIT [1].

Enfin, une fonctionnalité essentielle de *Polyphemus* concerne les approches d'ensemble et la représentation des incertitudes. Ainsi, des travaux ont porté sur l'estimation des incertitudes dans les modèles de chimie-transport [2], que ce soit en terme d'évaluation [3] ou en proposant des méthodes de prévision d'ensemble [4].

Cet article fait un point sur la logique de développement, l'état d'avancement et sur des applications caractéristiques du système *Polyphemus*. Le système est développé sous licence GNU/GPL (le code est donc libre) : *Polyphemus* a vocation à être utilisé et développé par plusieurs équipes, que ce soit à des fins de recherche, d'étude ou d'application.

L'article est organisé de la manière suivante : le système est brièvement décrit dans la deuxième section, puis des applications sont présentées dans la troisième section. Une conclusion et des perspectives terminent l'article.

## 2. Le système *Polyphemus*

### 2.1. Conception

*Polyphemus* a été construit dans une optique différente de l'approche classique (modèle « tout en un »). Ce système de modélisation a une structure à quatre niveaux (Figure 1) :

- des bibliothèques de paramétrisations et de prétraitement des données atmosphériques (principalement AtmoData) ;
- des pilotes de modèles permettant de mettre en œuvre de manière aisée des fonctionnalités de haut niveau (simulations Monte-Carlo pour l'évaluation des incertitudes, prévision d'ensemble pour la simulation multimodèles, assimilation de données pour le couplage entre sorties de modèles et données mesurées, éventuellement pour effectuer la modélisation inverse, par exemple des émissions) ;
- des modèles indépendants (liste actuelle) :
  - un modèle gaussien stationnaire ;
  - un modèle gaussien à bouffées ;
  - le solveur numérique de chimie-transport Polair3D, ainsi que ses versions différenciées (modèles linéaire tangent et adjoint) ;
  - le solveur numérique de chimie-transport Castor (clone de Chimère gazeux) ;
  - les modèles d'aérosols MAM (modal) et SIREAM (résolu) ;
- une bibliothèque de post-traitement, AtmoPy, permettant de comparer à des observations, d'effectuer des analyses statistiques (par exemple, celles recommandées par l'US EPA en terme d'évaluation de modèles), de travailler sur les prévisions d'ensemble, et de gérer l'affichage graphique.

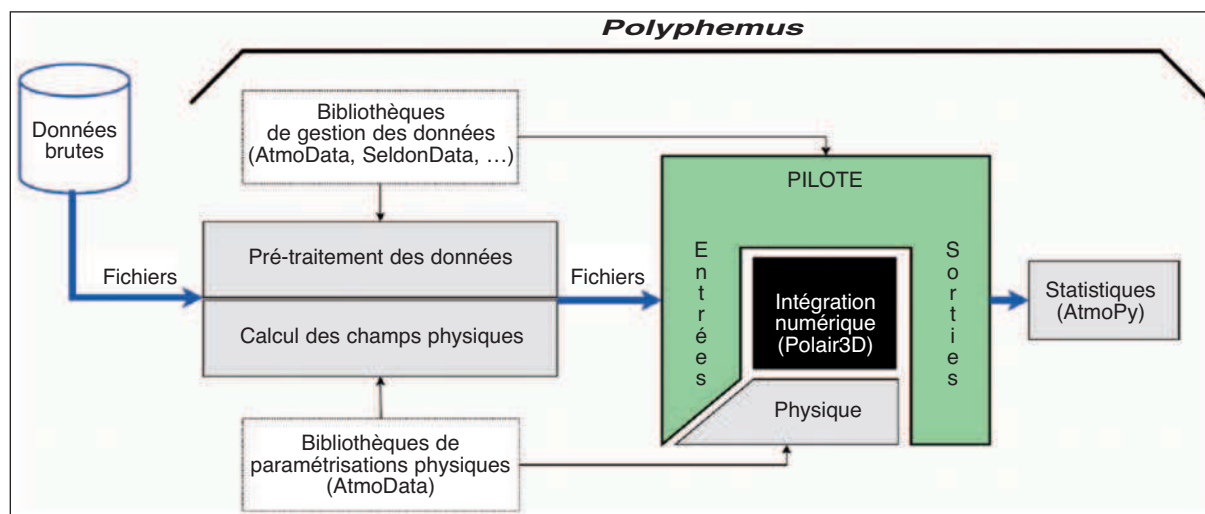


Figure 1.

Structure du système *Polyphemus* : pré-traitement (flexible et assorti de nombreuses options), modèle numérique (ici Polair3D), pilote (méthode avancée, par exemple d'assimilation de données) et post-traitement (statistiques, comparaison aux observations, affichage, etc.).

Structure of the *Polyphemus* system: pre-treatment (flexible and with many options), numerical model (here Polair3D), pilot (advanced methodology, for instance data assimilation) and post-treatment (statistics, comparison with observed values, screen display, etc.).

Une des principales motivations du développement de *Polyphemus* a été de bien distinguer ce qui est du ressort :

- du pré-traitement ;
- de la paramétrisation physique ;
- de la résolution numérique (ce que l'on désigne improprement par « modèle ») ;
- d'une utilisation élaborée ;

afin de pouvoir évoluer à faible coût vers d'autres entrées, d'autres paramétrisations, d'autres modèles ou d'autres utilisations.

Les nombreux pré-traitements possibles, l'ouverture à plusieurs modèles et l'existence de plusieurs pilotes pour l'utilisation des modèles font de *Polyphemus* une plate-forme flexible où de multiples alternatives existent. L'étymologie du nom du système est à cet égard révélatrice (en grec, *poly* signifie multiple et *phemus* dérive de *pheme* qui signifie voix).

## 2.2. Fonctionnalités

### 2.2.1. La bibliothèque de pré-traitement et de paramétrisations AtmoData

AtmoData a deux fonctionnalités :

- en tant que bibliothèque de pré-traitement, elle permet, sur la base de champs météorologiques d'origines diverses (exemple : les champs peuvent provenir de ECMWF, MM5, bientôt NCEP et ALADIN), de calculer les entrées utiles pour les modèles (quels qu'ils soient) ;
- en tant que bibliothèque de paramétrisations, elle permet de mutualiser des fonctions physiques (par exemple l'ensemble des paramétrisations pour les aérosols) et de proposer plusieurs alternatives (exemples : Louis ou Troen & Mahrt pour la diffusion verticale, Wesely ou Zhang pour le dépôt, système binaire ou ternaire pour la nucléation, etc.).

AtmoData est essentiellement écrit en C++ afin de pouvoir gérer de manière efficace les données multi-dimensionnelles (les données sont associées en réalité à des coordonnées, ce qui permet une simplification des traitements). Certaines paramétrisations sont néanmoins écrites en Fortran 77.

Il est à noter que l'utilisation d'une telle bibliothèque est la clé pour pouvoir faire de la modélisation multimodèles, AtmoData étant le réceptacle de tout développement en paramétrisation et en pré-traitement, et ceci indépendamment des modèles à proprement parler. AtmoData est donc à voir comme une boîte à outils.

### 2.2.2. Pilotes

Les pilotes de *Polyphemus* servent à utiliser les modèles en :

- simulation directe ;
- simulation Monte-Carlo (en développement) ;
- assimilation de données (actuellement, trois pilotes implémentent trois méthodes séquentielles et un pilote variationnel est disponible pour la méthode 4D-Var).

Toutes ces fonctionnalités ont déjà été utilisées (voir la section consacrée aux applications), mais sans l'aide de pilotes, c'est-à-dire de manière moins automatisée et sans mise en commun des développements pour tous les modèles du système. Le développement de ces pilotes continue pour apporter à *Polyphemus* plusieurs méthodes de haut niveau.

Un pilote est écrit indépendamment du ou des modèles auxquels il fait appel. Cependant, il exige du ou des modèles une interface, souvent légère mais parfois indisponible. Il n'est donc pas toujours compatible avec tous les modèles. En particulier, si un modèle ne possède pas d'adjoint, son interface sera insuffisante pour le pilote 4D-Var.

### 2.2.3. Modèles

D'une certaine manière, ce niveau est le moins important de *Polyphemus*, qui peut s'appuyer sur des noyaux numériques indépendants.

Actuellement, *Polyphemus* s'appuie, pour la dispersion eulérienne tridimensionnelle, d'abord sur le modèle de chimie-transport Polair3D, réduit de fait à un simple intégrateur numérique pour la modélisation de la dispersion réactive. Polair3D présente l'avantage de pouvoir être différencié automatiquement (modèle adjoint, modèle linéaire tangent), ce qui permet de l'utiliser en 4D-Var et pour des études de sensibilité. Il dispose de plusieurs mécanismes chimiques (photochimie, mercure, métaux lourds, radionucléides).

Il contient également le noyau numérique Castor (Chimère en version gazeuse). La partie prétraitement de *Polyphemus* contient en outre les paramétrisations physiques de Chimère, qui, combinées avec le modèle numérique Castor, permettent de reproduire, à l'identique, les résultats de Chimère (version de novembre 2005).

Deux modèles d'aérosols (voir la description plus loin), MAM (*Modal Aerosol Model*) et SIREAM (*Size Resolved Aerosol Model*), sont couplés par ailleurs.

Deux modèles gaussiens (à bouffées et stationnaire) sont également inclus.

### 2.2.4. Bibliothèque de post-traitement AtmoPy

La bibliothèque AtmoPy (en Python) permet de manipuler les résultats de calcul, notamment en effectuant de nombreuses statistiques de comparaison aux observations (indicateurs MBE, MNBE, MNB, BF, NME, MFBE, MAGE, MNGE, FGE, UPA, RMSE, corrélation et scores recommandés par l'*US Environmental Protection Agency*). Elle permet de gérer plusieurs types d'observations, d'opérer des filtres, de générer des densités de probabilités, etc.

Elle intègre des fonctionnalités d'affichage (1D et 2D) qui peuvent faire de cette bibliothèque l'unique outil de traitement des sorties. Elle bénéficie de la puissance de développement du Python (facilité de Matlab et puissance des langages objet modernes), jusqu'en mode interactif.

Elle permet également de mettre en œuvre les méthodes d'ensemble (statistiques post-modèles : super-ensembles, machine *learning*, etc.), qui ont été testées.

### 2.3. Statut, mise à disposition et ressources

*Polyphemus* est développé sous licence libre GNU/GPL. Il est mis à disposition sous <http://cerea.enpc.fr/polyphemus/>. À l'heure où cet article est corrigé, la dernière version disponible en ligne (version 1.1) a été mise à jour en juin 2007.

Son développement est à ce jour porté par l'ENPC, l'INRIA, EDF R&D et l'IRSN, pour une équipe de développement d'une douzaine de personnes. En terme de documentation, *Polyphemus*, AtmoData (et les bibliothèques annexes SeldonData et Talos), Polair3D, Castor et AtmoPy disposent chacun soit d'un guide d'utilisation, soit d'une documentation de référence, soit des deux lorsque cela est pertinent, et aussi, le cas échéant, d'une documentation scientifique et d'une note de conception. Tous ces documents sont en ligne.

## 3. Applications et références

### 3.1. Modélisation multipolluants

#### 3.1.1. Photochimie

Le mécanisme chimique utilisé est, en général, RACM [25].

#### Europe

À l'échelle européenne, des travaux de validation ont été menés au cours de l'été 2001 [2, 5]. Sur cette base, l'estimation de la sensibilité des concentrations d'ozone aux émissions a été réalisée [6].

Pendant plusieurs mois, le système a tourné au quotidien sur la base des données Prév'air. Des résultats indicatifs de comparaison modèle-mesures sont donnés dans le Tableau 1, pour les prévisions J + 1 et J + 2 des pics d'ozone pour la période du 15 mai au 31 août 2005. Ces résultats ont été obtenus avec la configuration de référence de *Polyphemus* (avec Polair3D) pour Prév'air.

Enfin, le système participe aux projets européens NEEDS et HEIMTSA (avec EMEP et l'Université de Stuttgart/IER) pour le calcul des matrices de transfert (et des impacts).

#### Asie

Le système participe à l'exercice d'intercomparaison MICS-Asia, sous l'égide de IIASA, avec sept autres modèles [8, 9].

Tableau 1.

Statistiques Prév'air pour la configuration « de référence » de *Polyphemus* pour Prév'air.  
Pics d'ozone du 15 mai 2005 au 31 août 2005 en prévision J + 1 et J + 2.

Prev'air statistics for the "reference" configuration of *Polyphemus* for Prev'air.  
Ozone peaks from 15th of May 2005 to 31st of August 2005 in prevision mode J + 1 and J + 2.

Échéance	RMSE	Corrélation (%)	Bias Factor
J + 1	22,8	70,9	1,03
J + 2	23,7	67,9	1,03

### Échelle régionale

Le système tourne sur la région parisienne [10]. Le système a participé à l'exercice Escompte. Il est utilisé par EDF pour l'estimation de l'impact des rejets de ses centrales thermiques (PACA, Pologne...). Il a participé à un projet du PREDIT sur l'évaluation qualité de l'air du Plan de déplacement urbain (PDU) de Lille [12], allant jusqu'à l'estimation d'indicateurs sanitaires développés par l'Observatoire régional de la santé. Il est également utilisé par le CRIEPI (*Central Research Institute for Electric Power Industry*, Japon) pour la modélisation de la qualité de l'air sur Tokyo [11].

#### 3.1.2. Radionucléides

*Polyphemus* est un des éléments du futur outil de crise du Centre technique de crise de l'IRSN qui sera opérationnel début 2008. À des fins de validation, le système a notamment été appliqué à la simulation de la campagne ETEX (*European Tracer EXperiment*), de l'incident d'Algerias et de l'accident de Tchernobyl [13] (Figure 2) avec des résultats comparables à l'état de l'art international. Il a été utilisé par l'IRSN à des fins d'estimation des impacts de Tchernobyl.

Une étude de sensibilité aux diverses sources d'incertitudes (paramétrisations météorologiques, paramétrisation de lessivage, terme source) a également été menée.

#### 3.1.3. Mercure et métaux lourds

La modélisation du mercure et des métaux lourds a fait l'objet de publications [14-16]. Plusieurs niveaux de modélisation sont disponibles :

- pour le mercure, les champs chimiques sont soit climatologiques, soit précalculés par RACM ;
- pour les métaux lourds, ceux-ci se comportent soit comme des particules inertes (au sens de la dynamique des aérosols), soit couplés à la phase particulaire.

Un travail spécifique a porté sur la sensibilité des concentrations aux émissions et aux conditions aux limites (le mercure a un temps de vie de l'ordre de l'année et le forçage par les conditions aux limites a, de fait, une grande importance).

#### 3.1.4. Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens stationnaires et à bouffées ont été développés pour les espèces gazeuses et pour les particules passives (pas de chimie et granulométrie constante). Ces modèles reposent sur les paramétrisations de Briggs ou Doury pour le calcul des écarts types.

Les deux modèles ont été validés pour la dispersion d'espèces gazeuses par des comparaisons à des données expérimentales obtenues par l'École

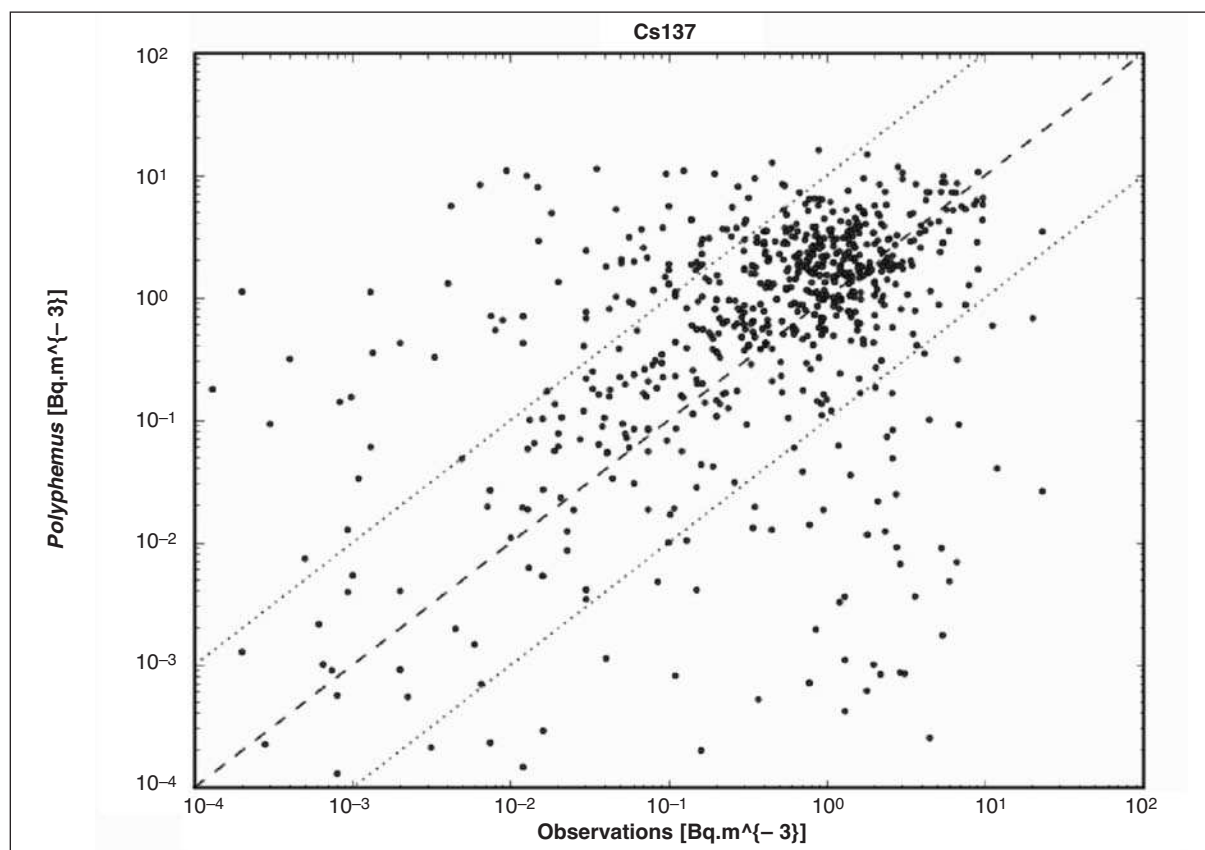


Figure 2.

Diagramme de dispersion modèle/mesures pour le césium 137, simulation Tchernobyl, avec champs météorologiques ECMWF.

Diagram showing the dispersion of model data versus measurements data for the cesium 137, Chernobyl simulation, with ECMWS meteorological fields.

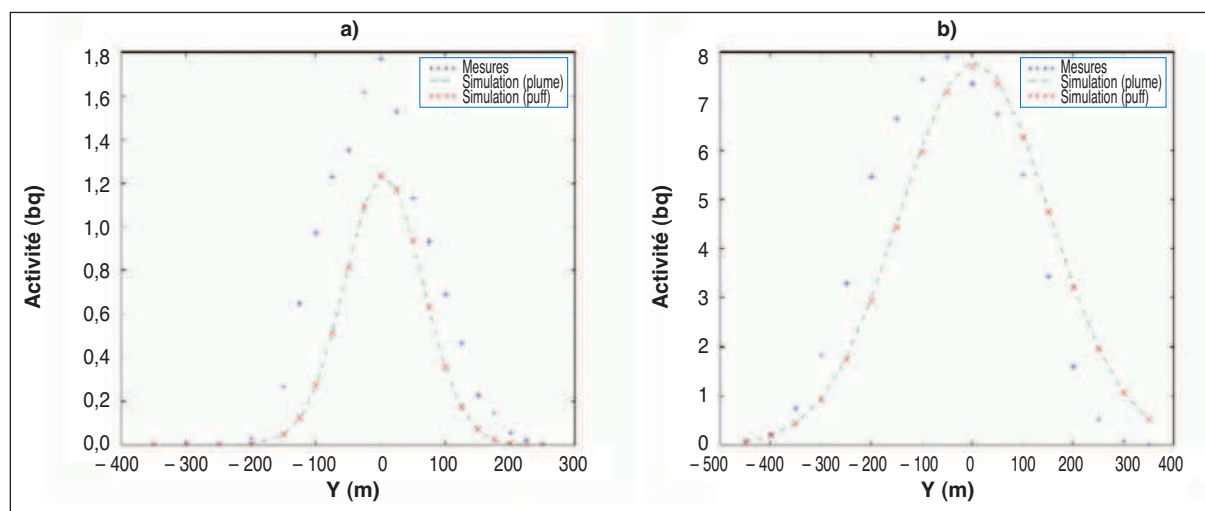


Figure 3.

Comparaison modèle gaussien stationnaire (plume) et à bouffée (puff) avec les mesures :  
 (a) profil de concentration à 850 m de la source ; (b) profil de concentration à 2 100 m de la source.

Comparison of stationary gaussian model (plume model) and of puff model with measurement data:  
 (a) Concentration profiles at 850 m from the source; (b) Concentration profiles at 2100 m from the source.

Centrale de Lyon. Ces données de souffleries visent à représenter la dispersion de traceurs émis par la cheminée de la centrale nucléaire du Bugey, en cas d'accident. Il s'agit donc d'un rejet gazeux continu par une source ponctuelle. La source continue a été discrétisée comme une somme de bouffées instantanées émises à intervalle régulier afin d'effectuer la simulation avec le modèle à bouffées. Les modèles donnent une bonne description des mesures prises dans la soufflerie pour les distances à la source supérieures à 500 m, où les profils de mesure atteignent la forme gaussienne. Des comparaisons modèle/mesure pour des profils de concentration au sol selon un axe transversal à la vitesse du vent sont présentées pour illustration à la distance de 850 m et 2 100 m par rapport à la source sous le vent.

Le modèle gaussien à bouffées est actuellement utilisé dans une étude sur l'évaluation des capacités de détection de réseaux de mesure pour la DGA.

### 3.2 Modélisation des aérosols

Deux modèles d'aérosols ont été développés et sont utilisés :

- MAM (*Modal Aerosol Model*), fondé sur une description modale [18] ;
- SIREAM (*Siream Aerosol Model*), fondé sur une description granulométrique résolue et un traitement hybride des processus de condensation/évaporation [19].

Ces modèles sont notamment couplés à une modélisation précise de la chimie en phase aqueuse, sur la base du modèle de chimie diphasique air/eau VSRM (*Variable Size Resolved Model*) qui comprend 70 espèces dissoutes et 120 réactions en phase aqueuse. Ce modèle, initialement développé à l'Université de Carnegie Mellon (États-Unis, Spyros Pandis) [26], a été adapté à *Polyphemus*.

L'ensemble de ces modèles a été mis en œuvre à l'échelle continentale sur l'Europe [20] et l'Asie [10] (exercice MICS-Asia). Des résultats sont, pour illustration, présentés dans la Figure 4 pour les  $PM_{10}$  et l'ozone pour une simulation sur l'Europe (été 2006) dans le cadre de l'exercice Prév'air.

À l'échelle régionale, ils ont été mis en œuvre sur Lille, Paris, la région PACA, la Pologne et Tokyo.

Un point intéressant est la possibilité de travailler avec de nombreuses paramétrisations différentes pour les modèles d'aérosols supportés par *Polyphemus*. Sartelet *et al.* [9] comparent la variabilité apportée par l'aspect multiconfigurations de *Polyphemus* à la variabilité amenée par huit modèles 3D différents. Il est montré que *Polyphemus* est capable, pour les aérosols, de restituer cette variabilité.

### 3.3. Prévision d'ensemble

Plusieurs expériences de prévision d'ensemble [7], au sens large (c'est-à-dire en incluant les simulations Monte-Carlo), ont été menées. Elles ont eu deux objectifs majeurs :

- évaluer l'incertitude des concentrations simulées ;
- dépasser les limitations de l'incertitude en procédant à des combinaisons linéaires de modèles.

L'évaluation de l'incertitude s'est pour le moment limitée à l'incertitude *a priori*, c'est-à-dire sans la connaissance des observations (ce qui est le cas en prévision ou en étude d'impact). Elle a concerné l'incertitude due aux schémas numériques, aux données hors données météorologiques brutes (pour ces deux études, se référer à [5, 17]) et à la formulation du modèle [3]. Un résultat intéressant de ces études est la forte incertitude *a priori* sur les résultats de modèles, ce qui suggère fortement l'utilisation de méthodes d'ensemble pour la plupart des applications. De plus,

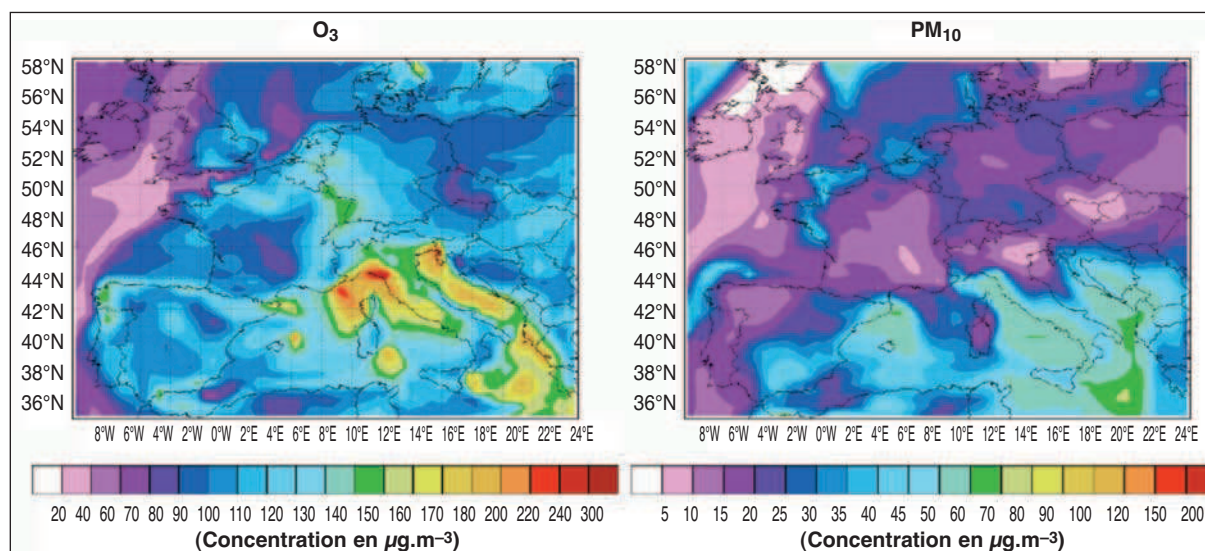


Figure 4.

Champs d'ozone et de  $PM_{10}$  simulés pour les tests Prév'air de l'été 2006.

Ozone and  $PM_{10}$  concentration fields simulated for Prév'air tests during summer 2006.

les sources d'incertitudes, hors champs météorologiques bruts, sont en premier lieu dues à la formulation du modèle. L'incertitude due aux données d'entrée n'est pas négligeable, mais elle est moindre. Un des avantages de *Polyphemus* est de pouvoir mener aisément de telles études.

Afin de donner un aperçu des résultats de simulations d'ensemble, la Figure 5 montre les concentrations moyennes d'ozone pour 48 modèles générés par *Polyphemus* et une densité de probabilité sur ce même profil, obtenue par des simulations Monte-Carlo (donc avec perturbation des données d'entrée).

Pour dépasser les limitations de l'incertitude, la modélisation inverse peut être une réponse (voir l'*item* suivant). Une autre stratégie réside dans la

combinaison linéaire de modèles. Les combinaisons linéaires de modèles montrent un potentiel très élevé d'amélioration des comparaisons aux observations [4]. Dans le cadre de prévisions quotidiennes, les coefficients des combinaisons linéaires doivent être prévus d'un jour à l'autre. Des méthodes simples ont été testées dans ce but, principalement avec le report pour le lendemain de coefficients optimaux sur une période d'apprentissage. Des améliorations significatives des prévisions sont obtenues de la sorte. Par exemple, des diminutions de l'erreur quadratique moyenne de 10 % sont obtenues (pics d'ozone, sur plusieurs mois de calcul). Des méthodes plus évoluées, issues de l'apprentissage statistique, sont désormais testées et ont un potentiel intéressant comme le montre le test préliminaire de [4].

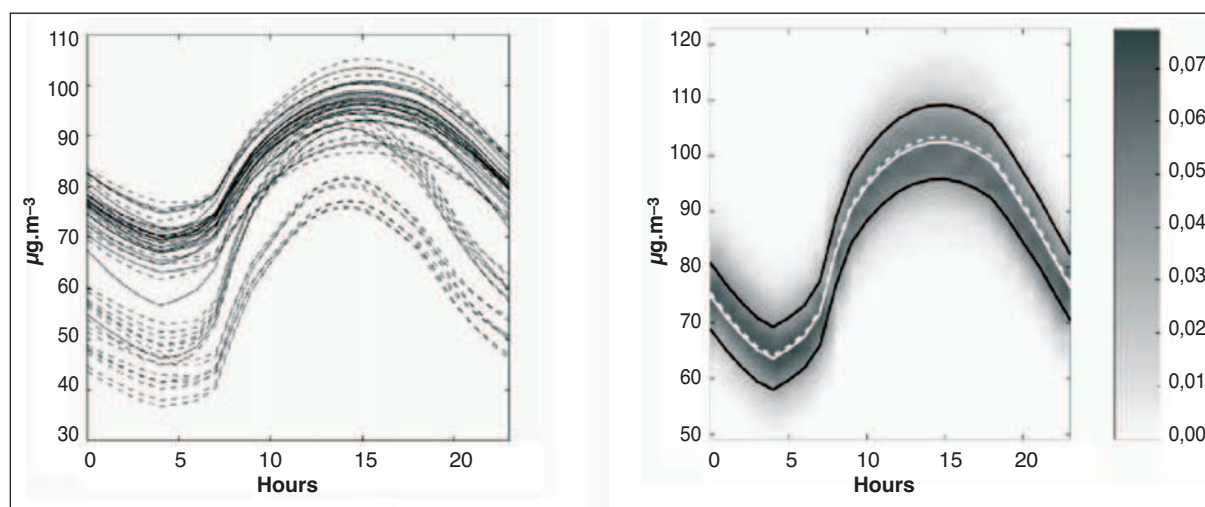


Figure 5.

(a) Profils journaliers d'ozone (moyennes spatio-temporelles) pour 48 modèles générés avec le système *Polyphemus*.

(b) Densité de probabilité du profil moyen d'ozone obtenu par des simulations Monte-Carlo (perturbation des principales données d'entrée hors données météorologiques brutes).

(a) Daily ozone profiles (space and time averages) for 48 models generated by the *Polyphemus* system.

(b) Probability density of the average ozone profile obtained by Monte-Carlo simulation (perturbation of the main input data except raw meteorological data).

### 3.4. Assimilation de données

Le système a été utilisé en modélisation inverse d'émissions ou d'autres flux :

- pour la photochimie (modélisation inverse des oxydes d'azote sur la région de Lille [21]) ;
- pour le mercure [22] ;
- pour des traceurs passifs/radionucléides [23, 24].

La comparaison des approches variationnelles et séquentielles pour la prévision de la qualité de l'air fait l'objet d'une action inter-projets de l'INRIA (impliquant trois projets de l'institut) appelée ADOQA (assimilation de données pour la qualité de l'air) et à laquelle l'INERIS est associée. Cette action est fondée sur la plate-forme *Polyphemus*.

## 4. Conclusions et perspectives

*Polyphemus* est un système de modélisation de la qualité de l'air d'un type nouveau qui se définit par sa modularité, sa qualité d'ingénierie logicielle et ses fonctionnalités de haut niveau. Il possède déjà de nombreuses applications et références.

Les perspectives liées au système *Polyphemus* sont de plusieurs ordres :

- les fonctionnalités de la plate-forme vont être étendues avec l'écriture de nouveaux pilotes (ce travail est en cours de réalisation) ;
- l'amélioration des capacités à petite échelle et une extension en forme de test à l'échelle hémisphérique ;
- le couplage avec d'autres modèles, notamment pour la description d'autres milieux physiques (sol et eau) ;
- les fonctionnalités d'assimilation de données séquentielles seront comparées à l'approche variationnelle dans le cadre du projet INRIA ADOQA, afin d'évaluer l'apport des approches d'assimilation de données ;
- le système va être utilisé pour calculer des matrices de transfert sources/récepteurs au niveau européen pour plusieurs années météorologiques ;
- pour ce qui concerne la qualité de l'air, d'autres sorties du système vont être ajoutées pour l'évaluation des impacts (par exemple des cartes d'exposition).

## Références

Les références sont disponibles sur le site [www.enpc.fr/cerea](http://www.enpc.fr/cerea)

1. Sportisse B *et al.* Rapport du projet PAM (Pollution atmosphérique multiphasique), programme Primequal-Predit. Partie I : Modélisation. Technical Report CERECA 2006.1.
2. Mallet V. Estimation de l'incertitude et prévision d'ensemble avec un modèle de chimie-transport – Application à la simulation de la qualité de l'air. Thèse de l'École nationale des Ponts et Chaussées 2005.
3. Mallet V, Sportisse B. Uncertainty in a chemistry-transport model due to physical parameterizations and numerical approximations: an ensemble approach applied to ozone modelling. *J. Geophys. Res.* 2006 ; 111 : D01302.
4. Mallet V, Sportisse B. Ensemble-based air quality forecasts: A multimodel approach applied to ozone. *J. Geophys. Res.* 2006 ; 111 : D18.
5. Mallet V, Sportisse B. 3-D chemistry-transport model Polair: numerical issues, validation and automatic-differentiation strategy. *Atmospheric. Chem. Phys. Discuss.* 2004 ; 4 : 1371-92.
6. Mallet V, Sportisse B. A comprehensive study of ozone sensitivity with respect to emissions over Europe with a chemistry-transport model. *J. Geophys. Res.* 2005 ; 110 : D22.
7. Mallet V, Sportisse B. Air Quality Modelling: from deterministic to stochastic modelling. *Computers and Mathematics with Application* 2006. Accepted for publication.
8. Han Z, Sakurai T, Ueda H, Matsuda K, Hozumi Y *et al.* MICS-Asia Phase II Study: Model Intercomparison and Evaluation of Ozone and Relevant Species, *Atmos. Env.* 2006. In revision.
9. Sartelet KN *et al.* MICS-Asia Phase II Aerosols, sensitivity to the aerosol module. *Atmos. Env.* 2006. In revision.
10. Tombette M, Sportisse B. Aerosol modelling at regional scale: Model-to-data comparison and sensitivity analysis over Greater Paris, *Atmos. Env.* 2006. Accepted for publication.
11. Sartelet KN, Hayami H, Sportisse, B. Application of the 3D CTM Polair3D to air quality over Greater Tokyo. *Atmos. Env.* 2006. Submitted.
12. Quélo D. Simulation numérique et assimilation de données variationnelles pour la dispersion atmosphérique de polluants. Thèse de l'École nationale des Ponts et Chaussées.
13. Quélo D, Krysta M, Bocquet M, Isnard O, Minier Y, Sportisse B. Validation of the Polyphemus platform: the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases. *Atmos. Env.* 2006. In revision.
14. Roustan Y, Bocquet M. Sensitivity analysis for mercury over Europe. *J. Geophys. Res.* 2006 ; 111 : D14304.
15. Roustan Y, Bocquet M, Musson-Genon L, Sportisse B. Modélisation du mercure, du plomb et du cadmium à l'échelle européenne. *Pollution Atmosphérique* 2006 ; 191 : 317-26.



16. Roustan Y. Modélisation de la dispersion atmosphérique du mercure, du plomb et du cadmium à l'échelle européenne. Thèse de l'École nationale des Ponts et Chaussées.
17. Mallet V, Pourchet A, Quélo D, Sportisse B. Investigation of some numerical issues for Chemistry-Transport Models: Gas-phase simulations. *J. Geophys. Res.* 2006. Submitted.
18. Sartelet K, Hayami H, Albriet B, Sportisse B. Development and preliminary validation of a modal aerosol model for tropospheric chemistry: MAM. *Aerosol Science and Technology* 2005 ; 40 (2) : 118-27.
19. Debry E, Fahey K, Sartelet K, Sportisse B, Tombette M. A new Size Resolved Aerosol Model: SIREAM, ACPD, 2006. Accepted for publication.
20. Fahey K, Debry E, Foudhil H, Sportisse B. Formulation, development and preliminary validation of the Size Resolved Aerosol Model, SIREAM. Proceeding GLOREAM (Global and Regional Atmospheric Modeling) 2004.
21. Quélo D, Mallet V, Sportisse B. Inverse modelling of NO<sub>x</sub> emissions at regional scale over Northern France: Preliminary investigation of the second-order sensitivity. *J. Geophys. Res.* 2005 ; 110 : D24310.
22. Roustan Y, Bocquet M. Inverse modelling for mercury over Europe. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* 2006 ; Id 1680-7375/acpd/2006-6-795 : 795-838.
23. Krysta M, Bocquet M, Sportisse B, Isnard O. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: an application to wind tunnel data. *Atmos. Env.* 2006 ; 40 (38) : 7267-79.
24. Krysta M, Bocquet M. Source reconstruction of an accidental radionuclide release at European scale. QJRMS 2006. Accepted for publication.
25. Stockwell W, Kirchner F, Kuhn M, Seefeld S. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modelling. *J. Geophys. Res.* 1997 ; 102 : D22.
26. Fahey K. Cloud and fog processing of aerosols: modelling the evolution of atmospheric species in aqueous phase. Thèse de Carnegie Mellon University.

