



HAL
open science

Photochimie et Aérosol en Région Alpine : Mélange et Transport

Eric Chaxel

► **To cite this version:**

Eric Chaxel. Photochimie et Aérosol en Région Alpine : Mélange et Transport. Océan, Atmosphère. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2006. Français. NNT : . tel-00116356

HAL Id: tel-00116356

<https://theses.hal.science/tel-00116356>

Submitted on 26 Nov 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse

présentée par

Eric CHAXEL

pour obtenir le titre de

Docteur

de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I

(Arrêté ministériel du 25 avril 2002 relatif aux études doctorales)

Spécialité : Climat et Physico-Chimie de l'Atmosphère

**Photochimie et Aérosol en Région Alpine :
Mélange et Transport**

Date de soutenance : 7 novembre 2006

Composition du jury :

Alain Clappier	[Rapporteur] EPFL, Lausanne (Suisse)
Vincent-Henri Peuch	[Rapporteur] Météo France, Toulouse
Christophe Ferrari	[Examineur, Président] LGGE, Grenoble
Robert Vautard	[Examineur] LSCE, Paris
Jean-Pierre Chollet	[Directeur de thèse] LEGI, Grenoble
Marie-Blanche Personnaz	[Invitée] GIERSA, Grenoble

Thèse encadrée par Jean-Pierre Chollet, Prof., UJF - Grenoble I

Thèse préparée au sein du

Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels (UMR 5519)

Photochimie et Aérosol en Région Alpine : Mélange et Transport

Eric Chaxel

Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier - Grenoble I

Préparée au sein du :

*Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels
Ecole Nationale Supérieure d'Hydraulique et de Mécanique de Grenoble
1025 rue de la piscine – Domaine Universitaire
38 402 Saint Martin D'Hères Cedex*

Reproduite par :

*Service Visualisation/Reprographie de l'ENSHMG
Ecole Nationale Supérieure d'Hydraulique et de Mécanique de Grenoble
1025 rue de la piscine – Domaine Universitaire
38 402 Saint Martin D'Hères Cedex*

© Eric Chaxel, 2006

Toute représentation ou reproduction, intégrale ou partielle, faite sans le consentement de l'auteur, de ses ayants droit, ou ayant cause, est illicite (loi du 11 mars 1957, alinéa 1er de l'article 40). Cette représentation ou reproduction, par quelque procédé que ce soit, constituerait une contrefaçon sanctionnée par les articles 425 et suivants du Code pénal. La loi du 11 mars 1957 autorise uniquement, aux termes des alinéas 2 et 3 de l'article 41, les copies ou reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective d'une part et, d'autre part, les analyses et les courtes citations dans un but d'exemple et d'illustration.

*A quoi bon soulever des montagnes quand
il est si simple de passer par dessus ?*

Boris Vian

Résumé/abstract

Photochimie et Aérosol en Région Alpine : Mélange et Transport

Le relief Alpin modifie de manière importante la circulation de l'atmosphère. Grâce à l'étude de différentes configurations, en période hivernale et estivale, et différentes régions des Alpes, ce travail expose comment se réalisent le mélange et le transport des polluants gazeux et particulaires depuis leurs sources d'émissions jusque dans la troposphère libre. Grâce à des résultats d'observation réalisés dans le Y grenoblois ces dernières années et des simulations numériques provenant d'une chaîne de modèles eulériens, ce travail explicite les mécanismes mis en jeu dans un cas de pollution photochimique estivale et un cas de pollution hivernale par les particules fines et par le benzène. Après la validation des modèles en utilisant des données expérimentales des campagnes POVA, GRENOPHOT 99 et ESCOMPTE, la chaîne de modèles est utilisée pour simuler deux périodes très polluées dans la région de Grenoble : la canicule d'août 2003 et un long épisode d'inversion thermique en février 2005. Après coup, les incertitudes sur les résultats du modèle sont calculées. En appliquant la chaîne de modèles sur un événement très particulier faisant intervenir de l'ozone provenant de la stratosphère on montre comment les différentes échelles de temps et d'espace de l'atmosphère sont intimement couplées dans le relief complexe des Alpes.

Mots clés : pollution de l'air, relief complexe, transport, mélange, photochimie, aérosol, modélisation eulérienne

Photochemistry and Aerosol in Alpine Region: Mixing and Transport

The Alpine arc deeply interacts with general circulation of atmosphere. By studying configurations in summer and winter over various Alpine areas, this work explains how mixing and transport of airborne pollutants happen, both gaseous and particulate matter, from their emission sources to free troposphere. Using observational results and a comprehensive eulerian modelling system, one focuses on mechanisms of pollution by ozone in summer and by particulate matter and benzene in winter. After having validated the modelling system using datasets from field experiments POVA, GRENOPHOT and ESCOMPTE, it is applied on two periods with principal interest in the Grenoble area: one is the heatwave August 2003 and the other is a long episode of thermal inversion in February 2005. Uncertainties are also calculated. One finishes by applying the modelling chain to understand how a stratospheric intrusion following a tropopause fold affected the Alpine region in July 2004.

Keywords: air pollution, complex terrain, transport, mixing, photochemistry, aerosol, eulerian modelling

Remerciements

Mes premiers remerciements iront naturellement à Jean-Pierre Chollet qui m'a permis durant quatre ans de mener d'intéressantes recherches en environnement. Merci Jean-Pierre pour m'avoir donné autant de libertés dans mes recherches et de m'avoir permis de traiter un nombre aussi large de situations et problèmes. Ce travail n'aurait jamais pu être réalisé sans le programme POVA et Jean-Luc Jaffrezo à qui j'adresse toutes mes félicitations pour avoir permis à quelques jeunes chercheurs de comprendre l'atmosphère des vallées alpines.

Je tiens ensuite à remercier les personnes qui ont participé au contenu scientifique de la thèse, Olivier Couach pour ses remarques constructives sur ce travail, Robert Vautard pour m'avoir enseigné CHIMERE et Marie-Blanche Personnaz pour les intéressantes discussions sur les pollutions de notre jolie cité grenobloise. Je remercie au passage les équipes des réseaux de qualité de l'air, en particulier l'ASCOPARG et COPARLY pour leur accueil. Merci à l'équipe PME pour le travail réalisé sur le Plan de Protection de l'Atmosphère de Grenoble, qui a contribué grandement à améliorer l'outil de recherche et à Hervé Villard de l'Air de l'Ain et des Pays de Savoie pour l'intérêt porté sur notre travail dans les vallées.

Merci aux membres du jury de thèse, Vincent-Henri Peuch et Alain Clappier pour avoir pris le temps de lire et de faire leurs remarques constructives sur ce manuscrit, Christophe Ferrari et Robert Vautard pour évaluer le travail réalisé durant ces trois années de thèse.

Les simulations n'auraient pas pu être réalisées sans les données du centre européen de prévisions météorologiques à moyen terme. Merci également à Marion Pithon de Météo France pour l'accès aux données. Ce manuscrit présente des résultats de l'avion MetAir de Bruno Neininger et du LIDAR EPFL de Pablo Ristori. Je tiens à remercier différentes personnes qui ont contribué au chapitre 7 de la thèse et notamment Jérôme Brioude (LA) pour avoir réalisé les simulations FLEXPART et Andreas Stohl pour m'avoir conseillé d'étudier l'épisode de juillet 2004. Larry Horowitz (NOAA) a fourni les simulations MOZART, le réseau BUWAL a fourni les données pour la station de la Jungfrauoch, Jean-Pierre Cammas (LA) a fourni les données MOZAIC et le Service d'Aéronomie de l'IPSL a fourni les données de la station de l'Observatoire de Haute-Provence. Enfin, je félicite Silvan Perego pour son excellent code Metphomod.

Passés les remerciements académiques, j'aimerais remercier mes parents pour m'avoir permis de mener des études scientifiques aussi longues et pour avoir suscité chez moi un intérêt aussi fort pour la montagne lors des nombreuses randonnées et séjours au ski. C'est cet intérêt fort pour les reliefs qui ressort dans ce travail de thèse. Merci Sophie pour me faire partager tes si nombreux voyages dans de magnifiques coins du globe, continue ton exploration !

Je salue les personnels du LEGI pour leur bonne humeur quotidienne, les membres de son équipe de foot pour avoir continué à jouer malgré les goal-averages fortement négatifs, le service mission et la direction. Je n'oublierai pas le bureau G113, sa moquette murale beige et sa population de petits moutons. Je dois également le bon déroulement de la thèse aux personnes de l'école doctorale Terre Univers Environnement et particulièrement Anne-Marie Boullier. Je suis content d'avoir connu l'association des doctorants LaiTUE à travers les interventions de vulgarisation et les nombreux apéros. Merci enfin aux autres thésards avec qui j'ai partagé autant de moments, tant professionnels que personnels, Guillaume, Aurélie, Charles et Marine. Merci à toutes les personnes qui ont partagé un chemin, une voie, une cascade ou une trace avec moi. Bentech pour les premières escalades à Grenoble, Michel pour mes premiers Chamechaude, Seb pour les si nombreuses traces en poudre, Alex pour les piconades et Nico pour autant de formidables moments en montagne. Carine, Greg, Julia, Wiki et Marion pour les expéditions sur les falaises des Calanques, du Lubéron ou du Verdon. J'adresse un pardon collectif à tous ceux que j'ai traîné au moins une fois dans une horreur à Presles ou un PD Oisans. Merci à mes nombreux colocataires grenoblois et particulièrement Cédric pour avoir partagé ces moments rue Léon Jouhaux et en paroi.

Je voudrais enfin remercier Patrick, pour son sandwich et son verre d'eau, Serge pour ses excellents topos des alentours de Grenoble et Volodia pour son toponeige.

Sommaire

INTRODUCTION GENERALE	13
CHAPITRE 1. CONCEPTS GENERAUX SUR L'ATMOSPHERE ET SA DYNAMIQUE EN REGION MONTAGNEUSE	17
1.1. Concepts généraux sur l'atmosphère	19
1.2. Mouvements verticaux dans la troposphère et la basse stratosphère	23
1.2.1. La variation diurne de la CLA au-dessus d'un sol plat	25
1.2.2. Détermination expérimentale de la hauteur de la CLC en vallée	29
1.2.3. Systèmes de vent de vallée en terrain montagneux	32
1.2.4. La stratosphère et ses échanges avec la troposphère	35
1.3. La modélisation du mélange des polluants et de la photochimie en région montagneuse	36
CHAPITRE 2. DESCRIPTION DU SYSTEME DE MODELISATION PREVALP	39
2.1. Principe	41
2.2. Calcul régional MM5/CHIMERE	43
2.2.1. Le calcul régional MM5	45
2.2.2. Le modèle CHIMERE	55
2.3. Calcul MetPhoMod sur les domaines locaux	59
2.4. Interfaçage des différents modèles	66
2.5. Préparation des émissions anthropiques pour CHIMERE et Metphomod	71
2.5.1. Calcul d'un cadastre annuel à partir de l'inventaire EMEP (prepCadastre)	72
2.5.2. Calcul des émissions horaires pour les mécanismes MELCHIOR et RACM (CADASTRE)	73
2.6. Calcul des émissions biogéniques de CHIMERE et Metphomod	80
2.7. Quels modèles pour quelles échelles ?	83
CHAPITRE 3. VALIDATION DU SYSTEME PREVALP SUR LES EXPERIENCES GRENOPHOT 99 ET ESCOMPTE	89
3.1. Modélisation de la POI 1 de GRENOPHOT (25 au 27 juillet 1999) à l'aide de la chaîne de modèles PREVALP	92
3.1.1. Historique de la modélisation à Grenoble	92
3.1.2. La campagne GRENOPHOT 99	93
3.1.3. Phénomènes de mélange et de transport des vallées du Y grenoblois	94
3.1.4. Simulation numérique de la POI 1 de GRENOPHOT 99 avec la chaîne PREVALP	102

3.2.	Validation sur la Période d’Observation Intensive (POI) 2b ESCOMPTE : 23 au 27 juin 2001	110
3.2.1.	Paramètres de sols	112
3.2.2.	Principe de la simulation de la POI 2b à l’aide la chaîne PREVALP	119
3.2.3.	Validation du calcul dynamique et chimique sur la zone ESCOMPTE	121
3.2.4.	Conclusion sur la simulation de la POI 2 de ESCOMPTE	125
3.3.	Analogies entre le site grenoblois et la zone ESCOMPTE	125
 CHAPITRE 4. SIMULATIONS DE QUALITE DE L’AIR SUR LA REGION DE GRENOBLE EN ETE 2003 ET FEVRIER 2005		 129
4.1.	Photochimie de l’atmosphère de la cuvette grenobloise lors de la canicule de 2003	132
4.1.1.	L’été 2003 : l’été de la canicule	133
4.1.2.	Une modélisation spécifique de la période de canicule	135
4.1.3.	Calcul régional de la météorologie et de la chimie MM5 et CHIMERE	136
4.1.4.	Calcul de la météorologie sur le Y grenoblois	139
4.1.5.	Production locale d’ozone et régime de production de l’ozone	144
4.1.6.	Conclusion sur l’épisode de canicule	149
4.2.	Application de la chaîne de modèles pour l’étude d’un fort épisode de pollution hivernale en février 2005	151
4.2.1.	Situation météorologique grande échelle	152
4.2.2.	Situation météorologique de la vallée	153
4.2.3.	Modélisation de l’épisode	157
4.2.4.	Validation du calcul de la dynamique atmosphérique	161
4.2.5.	Mécanismes de mélange verticaux dans le Y grenoblois en hiver	169
4.2.6.	Conclusion sur la modélisation de l’épisode de février 2005	176
4.2.7.	Discussion : représentativité et fréquence des épisodes stables en vallée par utilisation des mesures radon et de radioactivité alpha et beta des aérosols	176
 CHAPITRE 5. VALIDATION DE LA CHAINE PREVALP PAR DES CAMPAGNES DE TUBES A DIFFUSION PASSIVE POUR LE BENZENE, LE NO₂ ET L’OZONE DANS LA REGION RHONE-ALPES		 179
5.1.	Interpolation géostatistique et modélisation déterministe	181
5.2.	Généralités sur les tubes à diffusion passive	182
5.3.	Cartographie du benzène et du NO₂ du 1^{er} au 16 février 2005	184
5.4.	Cartographie de l’ozone du 18 au 26 juin 2002	190
 CHAPITRE 6. CALCULS D’INCERTITUDES ET ETUDES DE SENSIBILITE LIES AUX EMISSIONS DE COV BIOGENIQUES ET AU CLIMAT		 197
6.1.	Principe des simulations de sensibilité	199

6.2.	Impact d'un réchauffement global	201
6.3.	Distribution et intensité des émissions biogéniques	204
6.4.	Impact de l'humidité du sol et de la canopée sur le développement de la CLC et la photochimie 214	
6.5.	Conclusions et perspectives	216
CHAPITRE 7. UN CAS DE FORTE INTRUSION D'OZONE STRATOSPHERIQUE DANS LES ALPES EN JUILLET 2004		219
7.1.	Problématique des STE et observations dans les Alpes en juillet 2004	221
7.2.	Caractérisation de l'intrusion en utilisant des mesures	223
7.3.	Modélisation à grande échelle	228
7.3.1.	Approche lagrangienne avec le modèle FLEXPART	228
7.3.2.	Approche eulérienne avec le modèle MOZART	229
7.3.3.	Comparaison des approches lagrangienne et eulérienne	229
7.4.	Impact sur l'ozone de la CLA en utilisant la chaîne PREVALP	232
7.5.	Discussion et conclusion	235
LISTE DES ILLUSTRATIONS		241
LISTE DES TABLES		249
LISTE DES RÉFÉRENCES		251
ANNEXES 261		
Annexe A.1. Liste des acronymes		263
Annexe A.2. Liste des symboles et constantes physiques et chimiques		265
Annexe A.3. Description des classes de la nomenclature SNAP niveau 1		267
Annexe A.4. Indicateurs de performance utilisés pour les scores de la chaîne PREVALP		269
Annexe B.1. Conversions entre systèmes géographiques (PROJECTION)		271
Annexe B.2. Paramètres de sol de Metphomod		273
Annexe B.3. Fichiers de paramètres MM5		275

Annexe C. Utilisation de la chaîne de modélisation modèle pour l'étude prospective de scénarios d'émissions à 2010	289
Annexe D. Article IJEP	295

Introduction générale

La pollution de l'air est un problème de société d'actualité. L'opinion publique est de plus en plus sensibilisée aux problèmes liés à la modification de la composition de l'atmosphère par l'Homme. Dans la vie de tous les jours, la pollution de l'air que nous respirons est considérée comme l'une des nuisances les plus importantes, particulièrement dans les grandes agglomérations. Malgré les efforts réalisés ces dernières années pour combattre cette pollution, les polluants dans l'atmosphère sont nombreux et ont des effets sur la santé parfois mal évalués ou méconnus. Ces dernières années, le public a été sensibilisé à la pollution par l'ozone troposphérique présent en grande quantité en été dans le voisinage des agglomérations. Dans les Alpes, les sources de la pollution sont concentrées dans les vallées. Cette localisation des sources imposées par le relief est une des raisons pour laquelle de nombreuses vallées connaissent d'importants problèmes de pollution. Ce travail de thèse va se focaliser sur la compréhension de quelques mécanismes contrôlant les niveaux de pollution en période estivale lors de pics de pollution par l'ozone et en période hivernale lors d'épisodes de pollution par les oxydes d'azote (NO_x), le benzène et les particules en suspension (PM₁₀) dans des régions montagneuses.

Historique de la pollution des vallées

L'activité industrielle a été la première responsable de pollutions dans les vallées. Les industries, très voraces en «houille blanche», l'hydroélectricité, se sont installées dans le fond des vallées. La Maurienne était dès la fin du XIX^{ème} siècle un centre de production d'aluminium qui tirait partie de nombreux barrages sur l'Arc. De nos jours, avec la fermeture des usines dans les vallées, le trafic routier est devenu la première cause de pollution dans les régions alpines. La Maurienne est maintenant un chemin autoroutier important entre la France et l'Italie depuis l'ouverture du tunnel en 1980. La vallée de Chamonix accueillait le trafic transfrontalier en son sein depuis l'inauguration du tunnel par Charles De Gaule en 1965. La construction de l'autoroute blanche à partir de 1973 dans la vallée de l'Arve et l'ouverture de l'autoroute de la Maurienne en 2000 ont transformé ces vallées en voies royales du trafic transalpin. Non loin des hautes vallées de l'Arve et de la Maurienne, l'agglomération de Grenoble évoque pour de nombreuses personnes la « ville la plus polluée de France » à cause du fameux effet « cuvette ». Les industries du ciment, du papier et de la chimie se sont installées dans les vallées du Drac et de l'Isère. Avec les progrès technologiques et une réglementation contraignant les industriels à utiliser des procédés propres, les industries ont considérablement réduit leurs émissions polluantes et nombre d'entre elles ont été victimes de la conjoncture économique. Le trafic routier est alors devenu la source principale de pollution dans l'agglomération grenobloise. Actuellement Grenoble est soumise, comme les autres

vallées alpines, à d'importantes pollutions par les particules l'hiver sous le couvert d'inversions de températures très fréquentes. La couche grisâtre en fond de vallée formée par les particules en suspension et l'humidité qu'observent les skieurs depuis Chamrousse, situé à 1500 m au-dessus de Grenoble, nous rappelle que l'air des montagnes n'est pas si pur. Après la découverte des problèmes liés à l'ozone dans la troposphère dans les années 80, la cuvette fut touchée par cette pollution estivale. L'ozone produit à partir des précurseurs gazeux émis dans l'agglomération grenobloise s'ajoutait à la nuisance créée par la chaleur et le manque de vent en période estivale. Récemment, le programme de recherche Pollution des Vallées Alpines (POVA) a déterminé quel était le rôle des différentes sources (trafic, industries, chauffage) dans la pollution des vallées par les particules en suspension et l'ozone. Ce programme a fait ressortir que la pollution dans les vallées était très liée à la météorologie locale et que l'ozone estival était en grande partie importé depuis l'extérieur des vallées puis mélangé à l'air de la vallée sous l'effet de la dynamique locale.

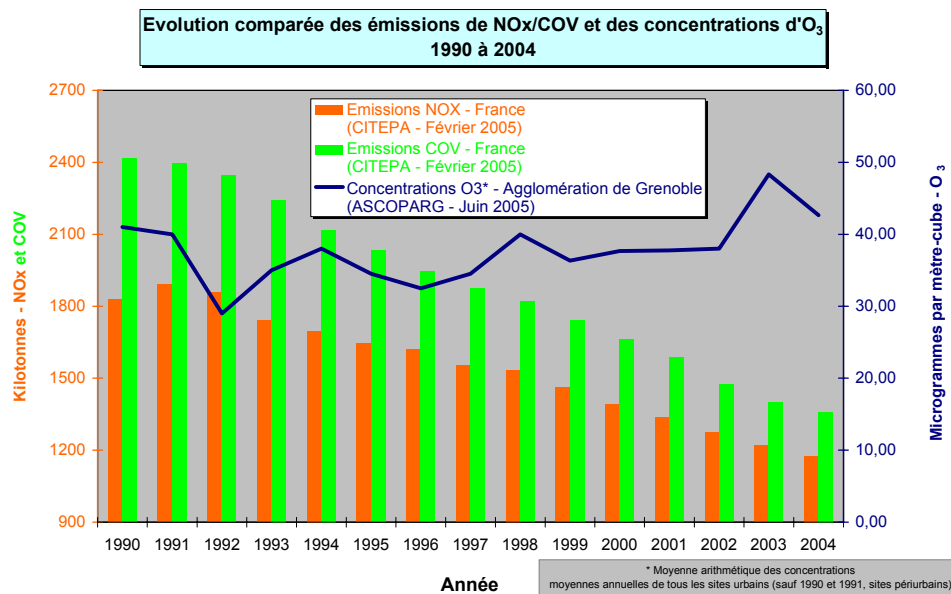


Figure i-1. Evolutions des émissions de NO_x et de COVNM en France et évolution de la concentration en moyenne annuelle en ozone à Grenoble (données ASCOPARG)

Problématiques de la pollution dans les vallées

Depuis une dizaine d'années, les émissions des précurseurs de l'ozone en France sont en chute libre. Pourtant comme le témoigne la figure i-1, les concentrations en ozone mesurées dans l'agglomération grenobloise ne montrent pas le même comportement. Les processus physicochimiques qui se cachent derrière ce phénomène non linéaire sont nombreux et complexes. Au niveau d'une agglomération quelle est alors la solution pour aboutir à une meilleure qualité de l'air ? Pour répondre à cette question, l'emploi de modèles complets traitant la météorologie et la chimie atmosphérique est nécessaire. Ces modèles doivent aussi

prendre en compte ce qui se passe à l'extérieur de l'agglomération. En effet l'ozone est présent en grande quantité dans l'atmosphère et sa concentration de fond peut varier de manière importante en quelques jours. Afin de mettre en place des réductions locales pour abaisser efficacement les concentrations d'ozone, il est nécessaire de connaître quel est l'apport d'ozone depuis l'extérieur de la région grenobloise. Ce travail de thèse propose d'évaluer de manière précise quels sont les apports extérieurs à la région alpine en différentes espèces, dont l'ozone. Cette quantification passe par la bonne description des processus de mélange en terrain montagneux et notamment la compréhension des processus à l'intérieur de la couche limite atmosphérique (CLA).

Mélange et transport des polluants en terrain complexe



Figure i-2. Pollution par les particules en hiver à Grenoble vue de la Bastille

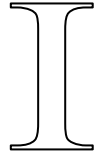
Les deux caractéristiques des vallées comparées à un sol plat sont la présence plus fréquente de couches d'inversion de température et de circulations atmosphériques générées ou fortement influencées par le relief. La description de la couche limite atmosphérique (CLA), couche de l'atmosphère au-dessus du sol dans laquelle se retrouvent piégés les polluants, est déterminante pour comprendre ces phénomènes de pollution. Aussi, même si les connaissances sur la CLA sur sol plat sont très avancées, il n'existe pas encore de théorie générale sur le

développement de la CLA dans un terrain montagneux. A l'aide de la modélisation numérique et de données collectées auprès de différents organismes, ce travail de thèse s'est attaché à décrire différents cas, estivaux et hivernaux, conduisant à des situations polluées dans le massif Alpin et particulièrement dans la région de Grenoble. On verra que selon la période de l'année et les polluants étudiés (ozone, benzène, PM_{10}), les mécanismes de mélange et de transport sont différents. Ce travail n'a pas pour ambition de dresser un catalogue des situations polluées mais de mettre en lumière certains mécanismes chimiques, de mélange et de transport qui jouent des rôles importants en cas d'épisode de pollution. La chimie de l'ozone et des particules secondaires sont des domaines de recherche en cours d'exploration. La prise en compte de l'évolution de la CLA et de la chimie de l'ozone, nécessitent l'utilisation de modèles complexes couplant la météorologie et la chimie de l'atmosphère.

L'objectif final de ce travail est de déterminer quels paramètres contrôlent les imports dans la vallée et les exports vers la troposphère libre d'espèces comme l'ozone, les particules et le benzène.

Plan de la thèse

Ce manuscrit fournit dans le chapitre 1 des notions sur la CLA en région montagneuse afin de situer le travail réalisé sur le plan de la dynamique de l'atmosphère. Ensuite, dans le chapitre 2, il détaille le développement d'une chaîne de modèles qui permet de bien décrire l'évolution des teneurs en de nombreuses espèces gazeuses et particulaires dans un terrain montagneux. Cet outil numérique baptisé PREVALP a été développé en se basant sur des expériences de terrain à Grenoble (expérience GRENOPHOT), dans les vallées de Chamonix et de Maurienne (expérience POVA) et dans la région des Préalpes du Sud et de Marseille (expérience ESCOMPTE). Cette chaîne de modèles est validée dans le chapitre 3 à l'aide de données expérimentales de chaque expérience. Le chapitre 4 présente l'étude de deux périodes polluées à Grenoble. La première est la période de canicule d'août 2003 où d'importants niveaux d'ozone ont été mesurés durant près de deux semaines. La seconde est la première quinzaine de février 2005 où la présence d'une inversion thermique en vallée a fait augmenter les niveaux de polluants de manière significative. L'étude de ces deux périodes permet de montrer quels sont les mécanismes de transport et de mélange au sein de la CLA et entre la CLA et la troposphère libre en été et en hiver. Le chapitre 4 montre également que des mesures de radon dans l'air réalisées à Grenoble depuis plus d'une décennie sont un bon indicateur de la stabilité de l'atmosphère. Le chapitre 5 fournit des validations supplémentaires à l'aide de campagnes de cartographie de la pollution au benzène et au NO₂ en février 2005 et à l'ozone en juin 2002. Le chapitre 6 propose une quantification des incertitudes de la chaîne de modèles pour des paramètres comme la température, l'humidité du sol et les émissions de composés organiques dans l'atmosphère par les végétaux. Enfin, les concentrations en ozone en région montagneuse peuvent être profondément dépendante des concentrations dans la troposphère libre. Nous montrerons dans le chapitre 7 comment une intrusion d'ozone stratosphérique dans la troposphère libre joue un rôle dans la photochimie de la partie occidentale des Alpes.



Chapitre 1. Concepts généraux sur l’atmosphère et sa dynamique en région montagneuse

La pollution atmosphérique est essentiellement liée à l’activité humaine. Les rejets gazeux et particulaires de l’Homme dans l’atmosphère terrestre vont modifier directement la composition de l’air ou réagir avec d’autres composés pour former des composés secondaires tels l’ozone ou les aérosols. Avant de traiter de la pollution de l’air, ce chapitre s’attache à décrire les couches de l’atmosphère et les mécanismes qui entrent en jeu dans la pollution de l’air. Afin d’éviter de nombreuses redites par rapport aux nombreux travaux sur la pollution de l’air, seuls les mécanismes qui contrôlent la pollution de l’air en terrain montagneux seront détaillés. La chimie de l’ozone dans la troposphère polluée a été présentée de manière assez exhaustive dans le rapport du DEA réalisé avant la thèse [Chaxel, 2003].

1.1. Concepts généraux sur l’atmosphère

On distingue généralement la basse atmosphère de la haute atmosphère. La science qui traite de la basse atmosphère est la météorologie alors que l’aérodologie est la science de la haute atmosphère. La limite entre ces deux parties de l’atmosphère peut être située vers 10 km, aux alentours de la tropopause. La loi de Laplace (1.1) fournit la correspondance entre la pression P et l’altitude au-dessus du sol z selon diverses hypothèses simplificatrices [Triplet and Roche, 1986].

$$z = 67,445 \times \bar{T}_v \times \log\left(\frac{P_0}{P}\right) \quad (1.1)$$

P_0 la pression au niveau de la mer (en Pa) et T_v est la température virtuelle de l’air (en K). Pour des pressions P proches de P_0 , on peut simplifier cette formule en (1.2).

$$z = 67,445 \times \bar{T}_v \times \left(\frac{P_0}{P} - 1\right) \quad (1.2)$$

La figure 1.1 fournit l’évolution de la température avec l’altitude le 13 août 2003 au-dessus de Payerne (Suisse). A l’aide du gradient de température selon la verticale $\partial T/\partial z$, on peut distinguer différentes couches. La troposphère est la couche de l’atmosphère directement au-dessus du sol et qui s’étend jusqu’à 10 à 15 km au-dessus du sol (environ 13 km sur la figure 1-1). La limite supérieure de cette couche est la tropopause. Le gradient de température dans la troposphère $\partial T/\partial z$ est négatif, ce qui signifie que la température diminue lorsqu’on s’élève. La troposphère se caractérise par des mouvements atmosphériques importants et sa hauteur varie suivant l’importance des mouvements verticaux, selon la période de l’année et selon la latitude. La stratosphère est située au-dessus de la tropopause et s’étend jusqu’à la stratopause située de 45 à 55 km au-dessus du sol. Le gradient thermique vertical $\partial T/\partial z$ en son sein est soit nul, soit positif. La stratosphère contient la grande partie de l’ozone (O_3) contenu dans l’atmosphère comme le montre la figure 1.1.

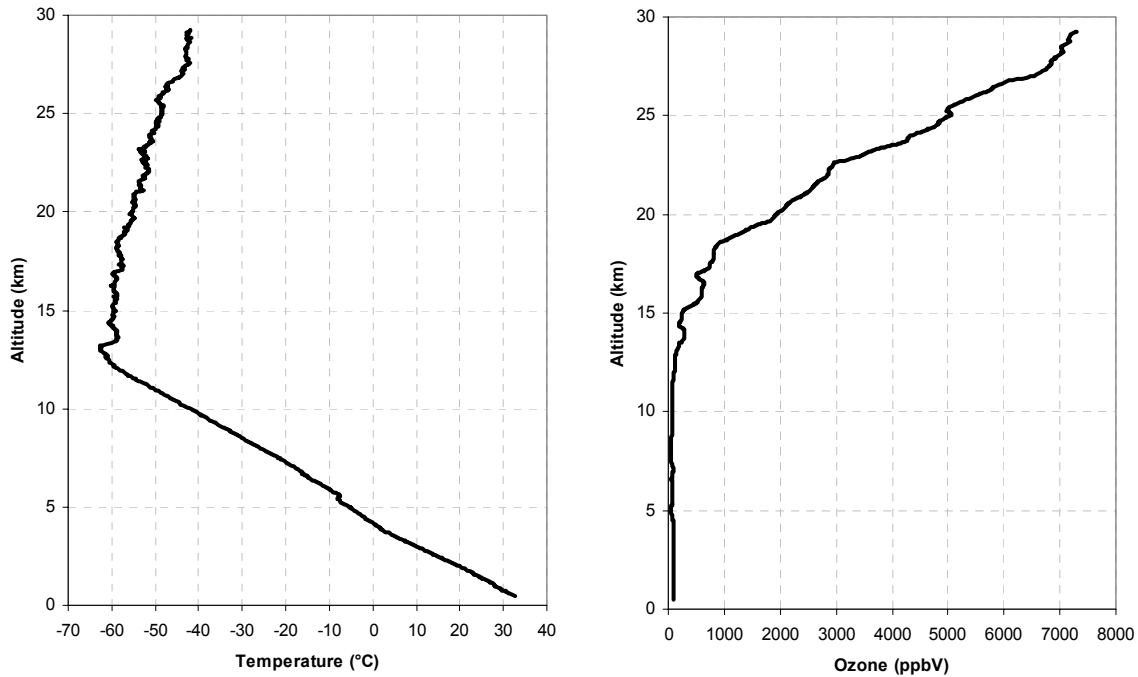


Figure 1-1 Evolution de la température et de la teneur en ozone à la verticale de Payerne (Suisse) le 13 août 2003 (données Meteo Swiss)

La mésosphère s’étend de la stratopause à la mésopause située de 80 à 90 km au-dessus du sol. Le gradient thermique vertical $\partial T/\partial z$ en son sein est négatif, c’est pour cette raison la couche la plus froide de l’atmosphère. La thermosphère possède une température élevée due à l’absorption du rayonnement solaire par les molécules de gaz N_2 et O_2 . La ionosphère est l’interface entre la mésosphère et la thermosphère. Le mélange vertical dans la thermosphère est rapide. Enfin l’exosphère est située à plus de 500 km du sol et la gravité y est si faible que des molécules de gaz peuvent s’en échapper. La majorité des processus liés à la qualité de l’air vont avoir lieu dans la troposphère. La stratosphère va jouer un rôle lors d’évènements assez rares comme celui présenté dans le chapitre 7.

Grandeurs physiques caractérisant la stabilité de la troposphère

La définition de la tropopause que fournit l’Organisation Mondiale de la Météorologie (WMO) est la région de l’atmosphère où le gradient $\partial T/\partial z$ de température verticale est inférieur à 2 °C/km sur plus de 2 km [Holton, Haynes, McIntyre, Douglas, Rood, and Pfister, 1995]. La hauteur de la tropopause qui matérialise le haut de la troposphère est située entre 8 km aux pôles et 18 km à l’équateur. La racine grecque *tropos* signifie en mouvement. La troposphère est en effet caractérisée par des mouvements importants à la fois horizontalement et verticalement. A cause de la présence de l’eau liquide et solide à la surface de la Terre, la troposphère contient la majorité de la vapeur d’eau présente dans l’atmosphère. La vapeur

d’eau, le gaz le plus important en météorologie, est à l’origine de nombreux phénomènes qui entrent en jeu dans le cycle de l’eau, comme les nuages ou les précipitations. A cause de la pression importante juste au-dessus du sol, la troposphère contient 80 % de la masse totale de l’atmosphère.

Pour l’air sec, on peut calculer le gradient de température d’une manière assez simple. Lorsqu’une particule d’air s’élève et reste insaturée (pas de condensation en gouttelettes de nuage), sa température varie selon le gradient adiabatique sec Γ_{sec} . Avec la relation de l’hydrostatique cette grandeur vaut $\Gamma_{sec} = g/c_p \approx 9,8 \text{ K km}^{-1}$, où g est l’accélération due à la gravité terrestre et c_p la chaleur spécifique massique de l’air sec à pression constante. Cependant dans l’atmosphère une parcelle d’air est rarement sèche. La vapeur d’eau contenue dans l’air va pouvoir subir des changements d’état et passer de l’état gazeux à l’état liquide (nuages, pluie) ou à l’état solide (nuages stratus, neige, grêle). Ces changements d’état peuvent être causés par des mouvements verticaux de la parcelle d’air. L’humidité relative HR est définie comme le rapport de la pression partielle e en vapeur d’eau d’un volume d’air sur la pression de vapeur saturante e_{sat} selon la relation (1.3).

$$HR = e/e_{sat} \quad (1.3)$$

Quand la pression de vapeur devient saturante, la particule d’air humide ne peut plus absorber de vapeur d’eau sans former de l’eau liquide. La pression partielle ne varie pas avec l’altitude, par contre la pression de vapeur saturante diminue avec une baisse de la température selon la loi de Clausius-Clapeyron (1.4).

$$e_{sat} = e_0 \exp\left(\frac{L_v}{R_{vapeur}}\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right) \quad (1.4)$$

avec e_0 la pression de vapeur saturante dans les conditions standards, R_{vapeur} la constante des gaz pour la vapeur d’eau, T_0 la température standard et L_v la chaleur latente de vaporisation. Selon la formule (1.4), une augmentation de l’altitude (la diminution de la pression et de la température) a pour impact de diminuer la pression de vapeur saturante et ainsi d’augmenter l’humidité relative d’une parcelle d’air. Lorsqu’une particule d’air s’élève suffisamment pour atteindre l’humidité de 100 %, une gouttelette de liquide apparaît. Les mouvements verticaux d’air humide peuvent ainsi aboutir à la formation de nuages. Lorsqu’une parcelle d’air est saturée, sa température varie selon le gradient adiabatique humide $\Gamma_{humide} \approx 6 \text{ K km}^{-1}$. La température potentielle pour l’air sec se définit par (1.5).

$$\theta_{sec} = T \cdot \left(\frac{P_0}{P}\right)^{R/c_p} \quad (1.5)$$

T la température du volume d’air, P la pression du volume d’air, P_0 la pression au niveau de la mer, R la constante des gaz parfaits et c_p la chaleur spécifique massique de l’air sec à pression constante. En présence de vapeur d’eau l’expression de la température potentielle devient (1.6).

$$\theta_{humide} = T \cdot \left(\frac{P_0}{P} \right)^{(1-0.251 \cdot q_v)R/c_p} \quad (1.6)$$

q_v est le rapport de mélange en vapeur d’eau (en kg d’eau par kg d’air). Etant donné que q_v est très petit devant 1 dans les régions tempérées, on utilise l’expression de la température potentielle pour l’air sec pour calculer la température potentielle de l’air humide non saturé, soit $\theta \approx \theta_{humide} \approx \theta_{sec}$. On définit la température virtuelle par (1.7) et la température potentielle virtuelle est définie par (1.8).

$$T_v = T(1 + 0,608 \cdot q_v) \quad (1.7)$$

$$\theta_v = T_v \cdot \left(\frac{P_0}{P} \right)^{R/c_p} \quad (1.8)$$

La pression de vapeur d’eau partielle est reliée au rapport de mélange par la relation (1.9).

$$e = \left(\frac{R_{vapeur}}{R_{air}} \right) \left(\frac{q_v}{1 - q_v} \right) P = \left(\frac{m_{air}}{m_{eau}} \right) \left(\frac{q_v}{1 - q_v} \right) P \quad (1.9)$$

q_v est le rapport de mélange en vapeur d’eau, P la pression atmosphérique, R_{air} la constante des gaz pour l’air, R_{vapeur} la constante des gaz pour la vapeur d’eau, m_{air} la masse molaire de l’air sec, m_{eau} la masse molaire de l’eau. Après simplification, on peut utiliser une définition différente de la température virtuelle (1.10).

$$T_v = T \left(1 + 0,378 \frac{e}{P} \right) \quad (1.10)$$

On montrera plus loin comment la température potentielle virtuelle est utilisée pour caractériser la stabilité de l’atmosphère.

La radiation solaire

La majorité de l’énergie que reçoit la surface de la Terre provient du Soleil. De nombreux phénomènes sont directement liés à la radiation solaire : convection et mélange, variation de température à la surface de la Terre, évaporation. Au sommet de l’atmosphère l’énergie solaire incidente possède un flux S_0 appelé constante solaire et qui vaut $S_0 = 1370 \text{ W m}^{-2}$ dans un plan perpendiculaire au rayonnement. La figure 1-2 fournit une vue complète des phénomènes radiatifs et des flux d’énergie (chaleur latente et chaleur sensible) qui ont lieu dans l’atmosphère. Les gaz à effet de serre absorbent une majeure partie de l’énergie IR émise par la Terre (350 W/m^2). Ils vont ensuite réémettre de l’énergie dans l’IR vers l’espace à hauteur de 195 W/m^2 . Seul un flux de 40 W/m^2 émis par le sol de la Terre est directement émis dans l’espace : c’est la fenêtre atmosphérique.

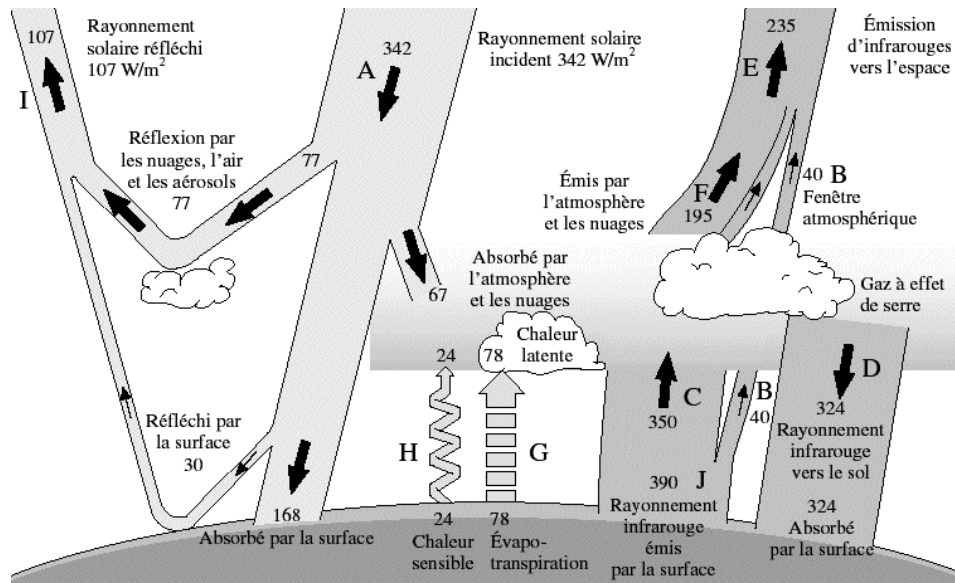


Figure 1-2. Schématisation des échanges radiatifs entre l'espace, l'atmosphère et le sol de la Terre (schéma CNRS)

1.2. Mouvements verticaux dans la troposphère et la basse stratosphère

Les mouvements verticaux dans la troposphère résultent de quatre grands phénomènes (figure 1-3) :

- la convection due au chauffage du sol par la radiation solaire : c'est le cas de la formation de cumulus de beau temps qui traduisent l'élévation de l'air humide ;
- la convergence (création d'une zone d'ascendance) ou la divergence (création d'une zone de subsidence) de flux horizontaux : c'est le cas dans les dépressions et les anticyclones ;
- le soulèvement de flux horizontaux rencontrant des reliefs : en rencontrant un relief l'air le contourne en s'élevant en altitude, on parle alors d'ascendance orographique ;
- l'élévation de l'air par changement d'état de l'eau (l'énergie de chaleur latente résultant du changement d'état est transférée à la particule sous forme d'énergie potentielle) : c'est le cas dans les cumulonimbus responsables des orages.

A l'échelle synoptique, ces mouvements verticaux ont des vitesses très faibles, de l'ordre de $10^{-2} m s^{-1}$. Localement la convection peut néanmoins induire des mouvements verticaux de l'ordre de plusieurs $m s^{-1}$. A l'échelle régionale, la topographie et l'hétérogénéité des sols vont contrôler de manière importante le développement de la convection et donner naissance à des circulations complexes telles les brises de mer et de terre [Puygrenier, Lohou, Campistron, Saïd, Pigeon, Bénech, and Serça, 2004] et les vents de vallée [Whiteman, 1990] qui vont déterminer la hauteur de la couche limite. Sur le relief alpin, la hauteur de la couche limite varie en espace et en temps de manière beaucoup plus complexe que sur sol plat et homogène.

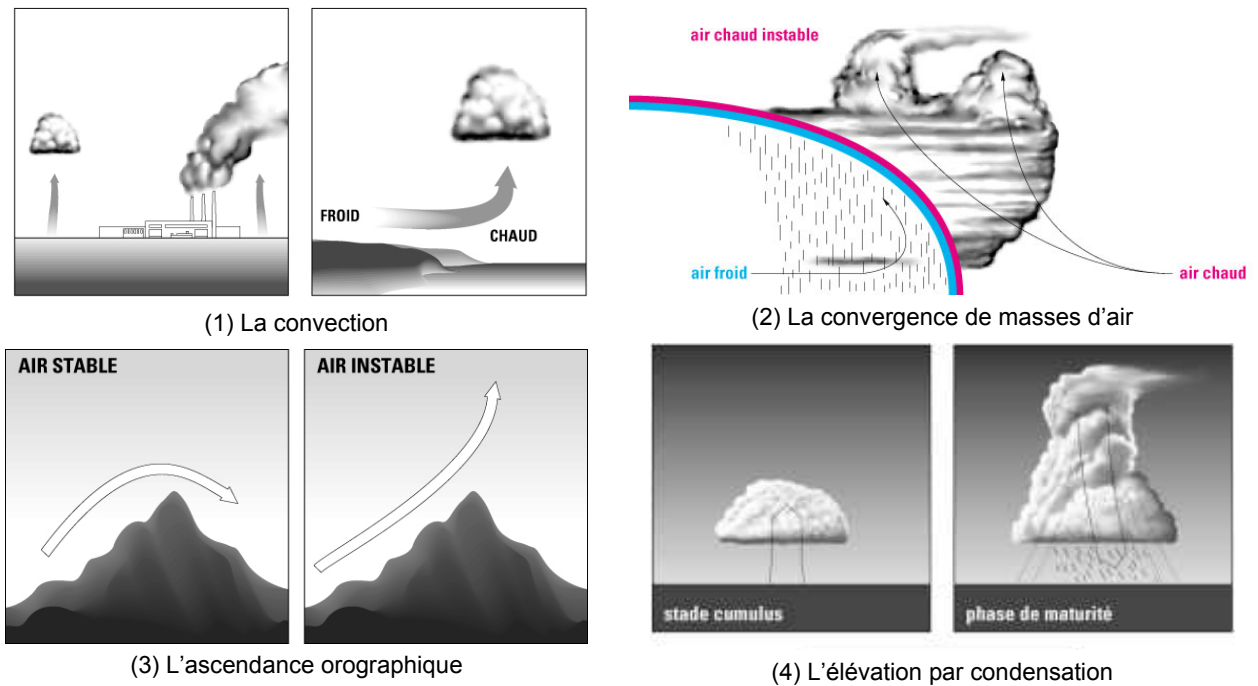


Figure 1-3. Les quatre types de mécanismes conduisant à des mouvements verticaux (schéma Service Météorologique du Canada)

La troposphère peut être décomposée en deux couches : la couche limite atmosphérique (CLA) au-dessus de la surface et la troposphère libre (TL) au-dessus. Il existe de nombreuses définitions de la CLA mais on retiendra que la CLA est la couche de l'atmosphère dont la dynamique et la composition chimique sont contrôlées directement par les processus d'échanges entre l'atmosphère et les couches superficielles de la Terre, ainsi que par les phénomènes de friction à la surface. Les échanges importants sont les échanges de chaleur, d'humidité et d'espèces gazeuses et particulaires, qui vont modifier la hauteur de la CLA avec des temps caractéristiques inférieurs à l'heure. A des échelles synoptiques, des obstacles tels les chaînes de montagnes vont modifier la circulation atmosphérique dans la CLA alors qu'à des échelles plus petites, la rugosité de la surface va jouer ce rôle. La TL est la couche située au-dessus la CLA et qui n'est pas influencée par les phénomènes cités plus haut. La circulation dans la TL est contrôlée uniquement par la distribution de pression en altitude, en admettant que les gradients de pression soient balancés par la force de Coriolis (hypothèse géostrophique). Si cette définition paraît assez simple en théorie, en pratique la détermination de ces deux couches est problématique, spécialement en terrain montagneux. En terrain complexe, les polluants gazeux émis par le sol, la végétation ou les activités humaines sont rapidement dilués dans la CLA par la turbulence générée par deux phénomènes : la convection et le cisaillement. La convection est souvent la source principale de turbulence et la CLA est souvent appelée couche limite convective (CLC). Seibert et al. [2000] propose de définir la CLC, en parlant de la hauteur du mélange comme *“the height of the layer adjacent to the ground over which pollutants or any constituents emitted within this layer or entrained*

into it become vertically dispersed by convection or mechanical turbulence within a time scale of about an hour”. Les espèces réactives émises au sol ou à proximité du sol et qui sont mélangées dans la CLC vont être dégradées avant leur entrée dans la TL. Ainsi la mesure en altitude de certaines espèces, comme les aérosols, permet de déterminer la hauteur du mélange. L’ozone, même s’il est présent en grande quantité dans la TL, peut être utilisé pour déterminer la hauteur de la CLC. Les variations verticales des niveaux d’ozone indiquent la présence d’autres polluants tels les composés organiques volatils (COV) ou les oxydes d’azotes (NO_x) émis au sol ou à proximité du sol. La hauteur de la CLC est un des facteurs les plus importants contrôlant les concentrations des espèces gazeuses et particulaires dans la CLA car cette hauteur détermine le volume dans lequel les espèces émises sont diluées.

1.2.1. La variation diurne de la CLA au-dessus d’un sol plat

Avant de traiter des cas de CLA en terrain montagneux, il est intéressant de décrire succinctement comment la CLA se comporte sur un sol plat. Le comportement de la CLA a été décrit de manière complète par Stull [1988]. Les mouvements verticaux, on l’a vu, sont essentiellement contrôlés dans la CLA par la convection créée par le réchauffement du sol. Par une journée ensoleillée, la CLA se développe suivant le cycle de la figure 1-4. Ce cycle est beaucoup plus prononcé sur les continents que sur les océans car la capacité thermique des sols continentaux est moindre par rapport à la capacité thermique des océans. Plus la capacité thermique du sol est faible, plus l’énergie solaire captée par le sol est réémise sous forme de chaleur dans l’atmosphère.

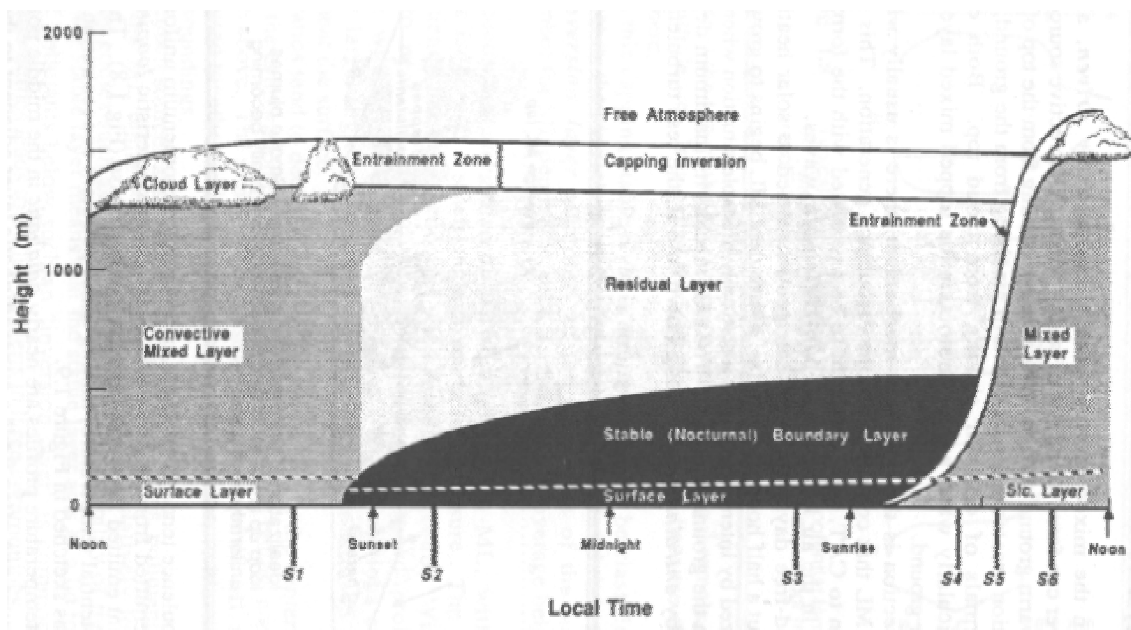


Figure 1-4. Cycle diurne de la CLA d’après Stull [1988]

On distingue trois couches au sein de la CLA : la CLC, la couche résiduelle et la couche limite stable (nocturne). La CLA est surmontée de la zone d’entraînement qui est une zone stable dans laquelle de l’air de la TL compense l’air qui quitte la CLA.

L’air provenant de la CLA est éjecté dans la TL par des thermiques. Les thermiques sont des poches d’air chaud qui s’élèvent depuis la couche de surface, où il règne durant la journée un gradient de température instable. En s’élevant à travers la CLA, l’air se refroidit avec un taux de 0,98 K par 100 m (gradient adiabatique sec Γ_{sec}) tant que la pression de vapeur e est inférieure à la pression de vapeur saturante e_{sat} . Lorsque la parcelle d’air atteint la pression de vapeur saturante, elle devient sursaturée et de la chaleur de condensation est transférée à l’air environnant. La parcelle se refroidit alors avec un taux de 0,6 K par 100 m (gradient adiabatique humide Γ_{humide}). Le profil vertical de température détermine la hauteur à laquelle la parcelle d’air n’est plus accélérée (flottabilité neutre) et où la parcelle est ralentie. Ces mouvements ascendants doivent être composés par des mouvements descendants si bien que par ce processus, le volume d’air de la CLC est mélangé. Les thermiques se forment au-dessus de surfaces qui transforment de manière effective l’énergie solaire en chaleur sensible, ainsi l’albédo de surface, la capacité thermique et la diffusivité du sol, l’évapotranspiration, l’inclinaison du terrain par rapport à la radiation, les effets d’ombrage sont des paramètres déterminants pour la génération de thermiques. Les cumulus qui se forment en milieu de journée indiquent la hauteur à laquelle l’air de la CLC pénètre la TL (figure 1-4). Ces nuages sont de bons indicateurs de la hauteur de la CLC. Si la TL est fortement stable, la convection au sein des cumulus est faible et la CLC est bien séparée de la TL. Si au contraire la TL est faiblement stable, en comparaison au gradient Γ_{humide} , la convection dans les cumulus se poursuit et la limite entre la CLC et la TL est impossible à déterminer. Dans le cas d’une TL stable, la hauteur de la CLC va augmenter durant la journée pour atteindre un maximum en fin d’après-midi.

Des observations ont montré que la hauteur de la CLC est homogène sur un terrain où les caractéristiques de la surface changent sur une échelle plus petite que la hauteur de la CLC. Cela n’est pas le cas dans les régions montagneuses et sur les côtes. A la fin de l’après-midi, le gradient dans la couche de surface, sous l’effet du refroidissement du sol par rayonnement IR, passe rapidement d’un gradient instable à un gradient stable. A ce moment, le développement de la CLC cesse et une couche stable nocturne se développe à la surface. La couche de surface se développe pendant la nuit dans le bas de la couche résiduelle au sein de laquelle un gradient de température neutre (adiabatique) est conservé. Les espèces gazeuses et particulaires émises dans la couche de surface durant la nuit s’y accumulent. Au lever du jour, le gradient de température au sol redevient instable et la couche de surface stable disparaît au profit de la CLC. Les polluants accumulés durant la nuit sont alors mélangés dans la CLC.

La variation diurne de la CLA dans une vallée

Dans le massif Alpin, les paramètres qui entrent en jeu dans le développement de la CLC et de la couche stable nocturne sont nombreux. Les versants ont des inclinaisons et des orientations différentes et sont soumis à des effets d’ombrage différents selon la présence d’un relief à leur proximité. La végétation est étagée à cause de l’altitude et sa hauteur, sa teneur en eau et sa densité varie considérablement entre le fond de vallée et les cimes comme le montre la figure 1-5. A cause de ces hétérogénéités, le réchauffement du sol se réalise de manière plus ou moins lente. Les différences de rugosité entre les différents couverts végétaux modifient la turbulence de surface et les flux de chaleur dans la couche de surface. A cause de ces différents processus le cycle classique décrit plus haut est beaucoup plus complexe et les variations de la hauteur de la CLC et de la couche stable de surface sont très dépendantes de l’emplacement géographique.

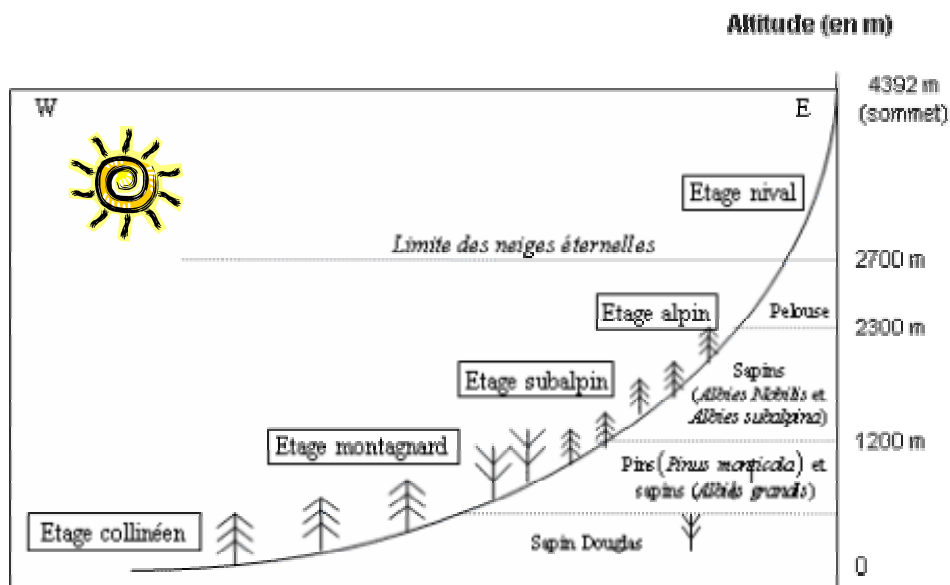


Figure 1-5. Etagement de la végétation dans un milieu montagnard d'après [Rougerie, 1990]

A cause des problèmes cités plus haut, il n’existe pas de théorie générale sur le développement de la CLC dans un terrain montagneux. Chaque région possède ces caractéristiques et de nombreuses particularités. Les expériences de terrain visant à déterminer au cas par cas le comportement de la CLC dans différentes régions des Alpes sont peu nombreuses. On citera les programmes ALPEX, VOTALP et MAP. En France, seuls les programmes GRENOPHOT et POVA se sont attachés à essayer de caractériser le comportement de la CLA en vallées alpines. On lira les manuscrits de thèse d’Olivier Couach [2002] et de Charles Chemel [2006] pour les conclusions sur l’évolution de la CLA tirées des mesures réalisées durant ces deux expériences. On regrette que les moyens d’investigation utilisés lors de ces expériences se soient concentrés à caractériser la photochimie (GRENOPHOT) et la chimie de l’aérosol (POVA) plutôt que la dynamique de la CLA. Le

programme ESCOMPTE est la seule expérience nationale qui s’est dotée de moyens d’investigation suffisamment nombreux pour bien caractériser le développement de la CLA dans un terrain complexe : celui de la région marseillaise [Cros, Durand, Cachier, Drobinski, Fréjafon, Kottmeier, Perros, Peuch, Ponche, Robin D., and al., 2004].

Wotawa et Kromp-Kolb [2000] et Steinbacher et al. [2004] propose une approche intéressante de la circulation sur l’arc alpin (figure 1-6). Dans cette approche, la troposphère libre et la CLA sont séparées par une couche intermédiaire : la couche d’injection (CI). Cette approche revient à prendre en compte l’échelle régionale et l’échelle locale dans le développement de la CLA. La CI correspond à une CLA interne à l’échelle des Alpes, créée par la friction du massif qui modifie la circulation synoptique. Localement, dans chaque vallée, une CLA se développe en fonction des régimes de vent de vallée locaux. On verra dans la suite du manuscrit que cette approche, appliquée à la plaine du Pô et au plateau suisse, s’applique très bien à la partie française des Alpes.

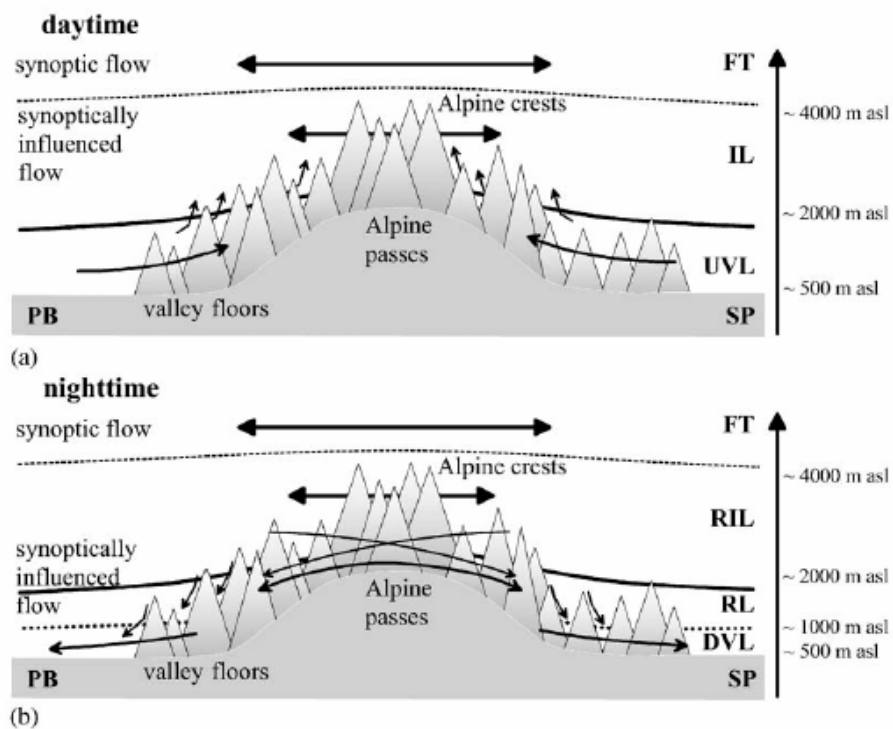


Figure 1-6. Schémas des systèmes de vent sur la topographie complexe des Alpes (a) durant la journée et (b) durant la nuit

FT: troposphère libre, IL: couche d’injection, UVL: vent de vallée montant, RIL: couche d’injection résiduelle, RL: couche résiduelle, DVL: vent de vallée descendant, PB : plaine du Pô, SP : plateau Suisse (tiré de Steinbacher et al. [2004])

Le programme VOTALP [Wotawa and Kromp-Kolb, 2000] a montré que le mélange vertical sur le massif alpin était plus important qu’en plaine et que les Alpes injectaient de l’ozone à des altitudes supérieures à 4000 m. La vulnérabilité des sommets alpins à des intrusions stratosphériques a également été démontrée par les travaux de Stohl et al. [2000].

1.2.2. Détermination expérimentale de la hauteur de la CLC en vallée

La hauteur de la CLC est déterminée expérimentalement en utilisant un profil de température sur la verticale est en étudiant les variations du gradient $\Gamma = \partial T / \partial z$. Dans la CLC, Γ prend des valeurs proches de Γ_{humide} , alors que dans la troposphère libre, il est inférieur à Γ_{humide} . En l’absence d’eau liquide, la température potentielle virtuelle reste constante dans la CLC. Dans les régions tempérées où l’humidité est faible, la température potentielle suit la même loi. Des profils de température potentielle virtuelle sont calculés à partir des radiosondages réalisés chaque jour par les services météorologiques nationaux. La hauteur de la CLC peut donc être déduite de ces radiosondages. La figure 1-7 présente les profils verticaux de température potentielle virtuelle réalisés dans la nuit du 1^{er} et du 13 août 2003 à Payerne (Suisse). Même si ces sondages sont réalisés durant la nuit, la couche résiduelle indique la position de la CLC avec à son sommet la zone d’entraînement. Au sol, on remarque l’apparition de la couche de surface. Les deux journées du 1^{er} et 13 août sont très différentes. En effet, la hauteur de la CLC le 1^{er} août atteint 1900 m asl, soit 1400 m agl puisque la station de Payerne se situe à 491 m d’altitude. La hauteur de la CLC était de 3500 m agl le 13 août. Une telle hauteur de CLC a été rarement observée puisque la hauteur moyenne de CLC observée à Payerne en été est de 1500 m [Neininger and Dommen, 1996].

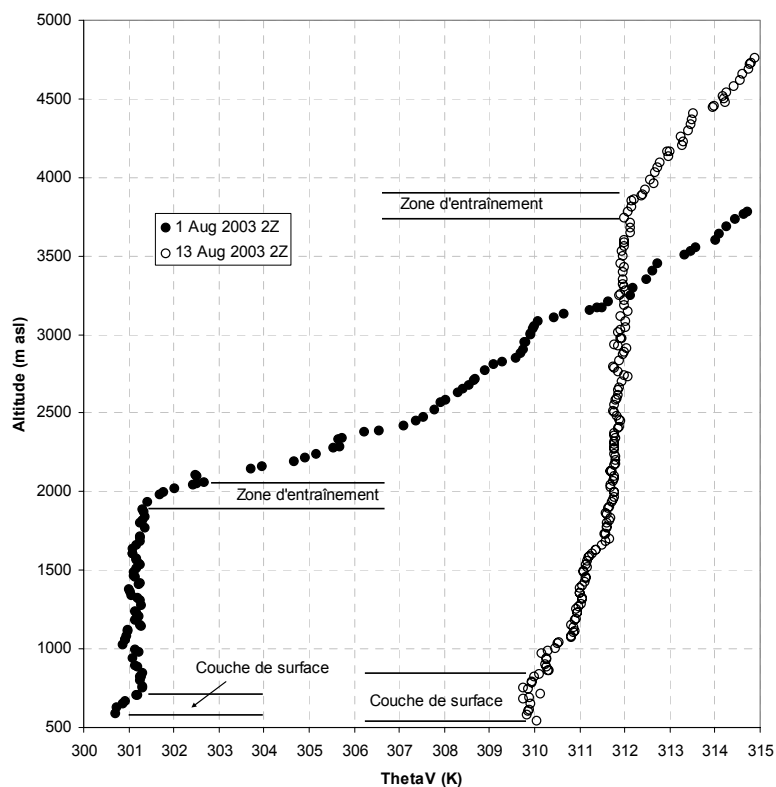


Figure 1-7. Mesures de température potentielle virtuelle réalisées par les radiosondages à Payerne (Suisse) les 1^{er} et 13 août 2003 à 2:00 TU (données Meteo Swiss)

A l’échelle d’une vallée, des phénomènes très locaux vont influencer le développement de la CLC. La figure 1-8 présente des profils verticaux d’ozone mesurés par une sonde ECC emportée par un ballon captif au-dessus d’un pré dans la vallée de Chamonix. Pour plus de détails sur les mesures on se reportera à [Chemel and Chollet, 2006]. On voit apparaître sur ces profils la montée progressive de la CLA à partir de 6h34 avec la dilution de l’ozone contenu dans la couche résiduelle dans les premières centaines de mètres au-dessus du sol. L’estimation de la hauteur en dessous de laquelle la concentration d’ozone est homogène, la couche de mélange (CLC), fournit les points de la figure 1-9. A partir de 10h34, on ne distingue plus de couche de mélange sur les profils et la concentration d’ozone dans la CLC commence à augmenter. A 11h00, on observe encore dans les premiers 100 mètres au-dessus du sol une légère décroissance des concentrations, c’est la déposition sèche. Cette décroissance est évaluée à $\partial[O_3]/\partial z = -5 \text{ ppbV}/100\text{m}$ à 11h00. La hauteur de la couche de mélange est représentée sur la figure 1-9. Ces mesures ont été utilisées pour la validation du schéma de CLA de MM5 dans la vallée de Chamonix [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005].

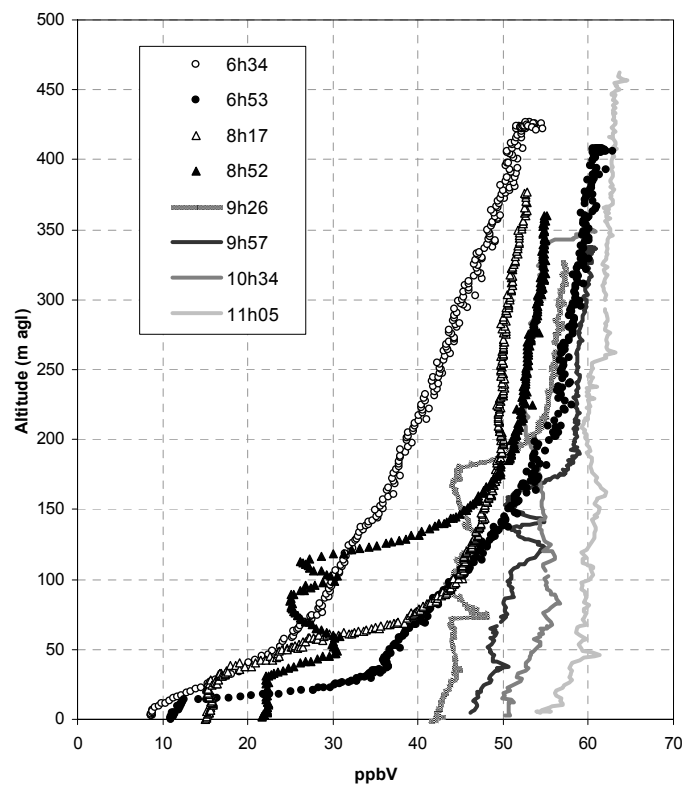


Figure 1-8. Mesures d’ozone par ballon captif réalisées le 8 juillet 2003 dans la matinée au-dessus d’un pré dans la plaine des Praz à l’altitude 1070 m (vallée de Chamonix). Les heures correspondent aux heures locales (TU+2) de décollage du ballon, chaque sondage durant environ 20 minutes.

Une autre détermination expérimentale de la hauteur de CLC réside dans l’utilisation d’un radar UHF. La détermination de la hauteur est réalisée à l’aide de la réflectivité radar [Chemel and Chollet, 2006]. La hauteur de CLC déterminée grâce au ballon captif sur la figure 1-9 a

été complétée à partir de 400 m agl par la mesure de la hauteur de CLC réalisée à l’aide d’un radar UHF situé à proximité du ballon captif. Une autre méthode pour mesurer la hauteur de la CLA est la mesure de la distribution verticale de l’aérosol et de l’humidité dans l’atmosphère. Les figures 1-10 et 1-11 montrent les profils verticaux de différentes variables météorologiques et de concentrations de différentes espèces obtenus dans la vallée du Grésivaudan (région de Grenoble) le 26 juillet 1999 au matin. On remarque que l’atmosphère de la vallée est stratifiée. La CLA est observée entre 200 m à 2000 m asl grâce aux profils d’aérosol et d’humidité. Entre 2000 m et 3000 m asl, on observe une couche où l’humidité et la concentration en aérosols décroît. La concentration d’ozone dans cette couche est élevée comparée à la couche résiduelle. Cette couche est la couche réservoir décrite par Couach [2002]. Sur le schéma de la figure 1-6, cette couche est nommée couche d’injection. L’ozone produit dans la CLC durant la journée est éjecté à plus haute altitude par les vents de pente et les thermiques. Cette couche d’injection est visible sur le profil de température potentielle virtuelle car elle est délimitée par deux zones où le gradient $\partial\theta_v/\partial z$ prend des valeurs plus fortes à 2000 m et 3000 m asl. Au-delà de 3000 m asl on retrouve la troposphère libre avec des concentration en aérosols quasiment nulles et une humidité faible.

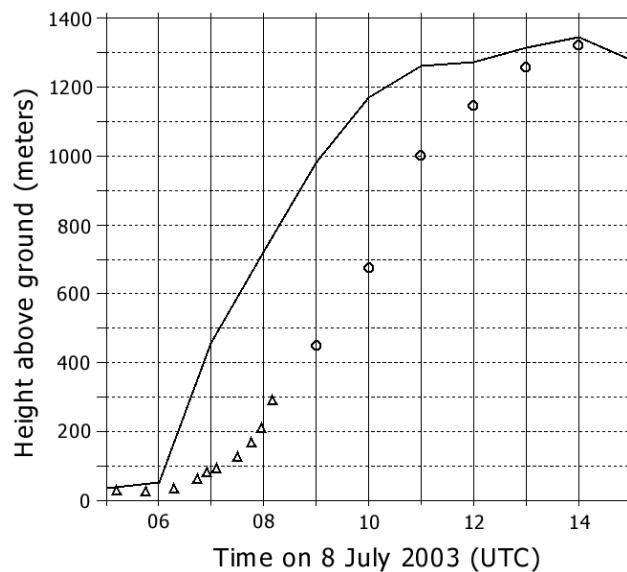


Figure 1-9. Estimation de la hauteur de la CLA à l’aide des profils verticaux d’ozone mesurés aux Praz (triangles) et des profils verticaux de vent au Clos de l’Ours (cercles) le 8 juillet 2003 dans la matinée. La ligne continue est la hauteur de CLA diagnostiquée par MM5. Figure extraite de Chaxel et al. [2005].

Cette circulation à 3 couches (couche de surface instable pendant la journée/stable durant la nuit, couche résiduelle et couche d’injection) est classique des vallées alpines. Le vent dans la couche d’injection est de direction contraire à la direction du vent dans la couche résiduelle. Ces différentes couches sont donc générées directement par la circulation des masses d’air dans la vallée. La couche d’injection observée entre 2000 m et 3000 m asl provient du sud de l’agglomération où elle se charge en ozone et en humidité durant la journée. Durant la nuit, le

vent de sud transporte cette masse d’air vers le nord, au-dessus de l’agglomération grenobloise et dans la vallée du Grésivaudan. Le chapitre 3 fournira plus d’éléments sur les mécanismes mis en jeu dans cette circulation à trois couches. On vient de voir que la stratification de l’atmosphère dans les vallées alpines est directement liée aux régimes de vents thermiques qui se développent durant la journée et durant la nuit. L’interaction des systèmes de vent de vallée propres à chaque vallée génère des circulations complexes. On fournit dans la suite une courte description des mécanismes mis en jeu dans la création des vents de vallées.

1.2.3. Systèmes de vent de vallée en terrain montagneux

Les mécanismes contrôlant les vents de vallée ont été décrits de manière exhaustive par Whiteman [1990]. Le réchauffement des pentes des vallées par la radiation solaire durant la journée conduit au réchauffement des basses couches et aboutit à la création de vents montants (anabatiques). A l’inverse durant la nuit, le refroidissement des pentes par radiation dans l’IR conduit au refroidissement de la couche de surface et la naissance de vents descendants les pentes (catabatiques). Dans une vallée avec une section transverse constante, les vents de pentes se développent normalement à l’axe (transversalement) de la vallée sans créer de circulation dans l’axe de vallée. A l’inverse, si la section n’est pas constante, on assiste à la génération d’un vent de vallée dans l’axe de la vallée. Ce vent est dirigé des grandes sections vers les petites durant la journée et des petites sections vers les grandes durant la nuit (figure 1-12). Dans le cas d’une pente infinie et dans le cas d’une stratification atmosphérique constante en pression et en température, Prandtl propose un modèle pour calculer la vitesse u' le long de la pente en fonction de l’altitude normale au sol z' selon la formule (1.11).

$$u'(z') = \frac{b_s}{N} \sqrt{\frac{\kappa}{\nu}} \exp\left(-\frac{z'}{\lambda}\right) \sin\left(\frac{z'}{\lambda}\right) \quad (1.11)$$

Dans ce modèle, le champ de flottabilité possède une stratification définie par :

$$B(x, z) = N^2 z + b(x, z) \text{ avec } b(z') = b_s \exp\left(-\frac{z'}{\lambda}\right) \cos\left(\frac{z'}{\lambda}\right) ; \lambda = \left(\frac{4\nu\kappa}{N^2 \sin^2 \alpha}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.12)$$

N est la fréquence de Brunt-Väisälä, z l’altitude sur la verticale, x la coordonnée horizontale, $k = R/c_p$, ν la viscosité dynamique.

Les dimensions de la vallée, l’inclinaison des pentes, l’orientation des versants ont un impact sur les vents de pente et de vallée. Des études avec des modèles en trois dimensions décrivant des vallées avec un relief idéalisé ont fait ressortir les mécanismes générant les vents de vallées montant ou descendant. On citera l’étude de [Rampanelli, Zardi, and Rotunno, 2004] qui met en lumière les mécanismes du vent de vallée montant en journée et la thèse de Kerbirou [2004] qui s’attache à décrire la dynamique dans une vallée idéalisée.

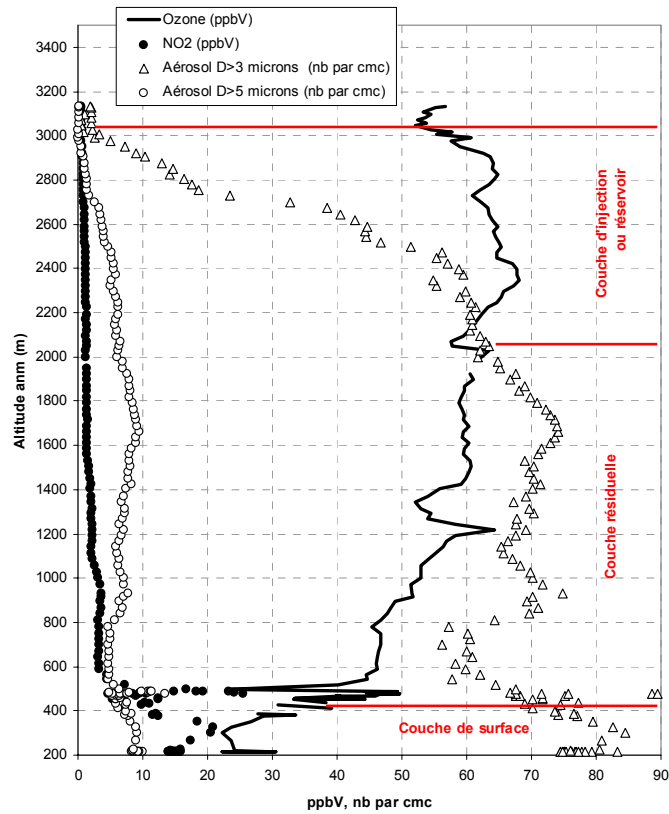


Figure 1-10. Profils verticaux de NO₂, d’ozone et d’aérosol réalisés par l’avion Metair entre 7:28 et 7:54 TU le 26 juillet 1999 à la verticale du Versoud (vallée du Grésivaudan)

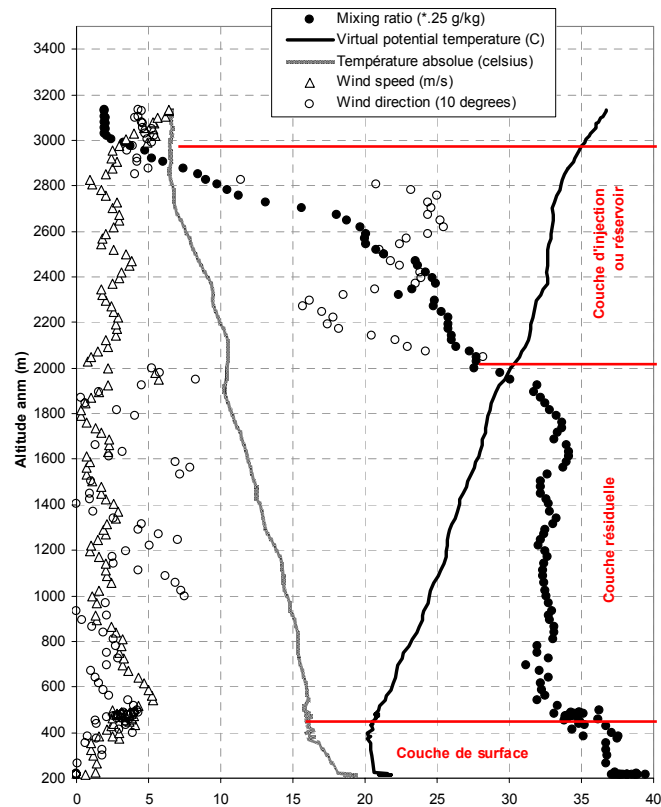


Figure 1-11. Profils verticaux de vent, θ_{virt} , d’humidité et de température réalisés par l’avion Metair entre 7:28 et 7:54 TU le 26 juillet 1999 à la verticale du Versoud (vallée du Grésivaudan)

Dans la réalité, chaque vallée, rarement rectiligne, possède ses propres caractéristiques. Dans ces conditions, les régimes de vent de vallée sont très complexes et la description d’une situation réelle nécessite l’utilisation de modèles en trois dimensions. Plusieurs études numériques ont complété des expériences de terrain réalisées dans différentes vallées. On citera le Y Grenoblois [Couach, Balin, Jiménez, Ristori, Perego, Kirchner, Simeonov, Calpini, and van den Bergh, 2003], la vallée de Chamonix [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005], la vallée de Maurienne [Brulfert, Chemel, Chaxel, and Chollet, 2005], la vallée de Mesolcina [Furger, Dommen, Graber, Poggio, Prevot, Emeis, Grell, Trickl, Gomiscek, Neininger, and Wotawa, 2000], la vallée de Leventina [Henne, Furger, Nyeki, Steinbacher, Neininger, De Wekker, Dommen, Spichtinger, Stohl, and Prévôt, 2004] et la vallée Riviera [De Wekker, Steyn, Fast, Rotach, and Zhong, 2005]. Toutes ces études mettent en lumière des circulations atmosphériques propres à chaque vallée. Le mélange associé aux circulations est quantifié à l’aide de dispositifs expérimentaux comme les profileurs de vent, les LIDAR ou les ballons sonde.

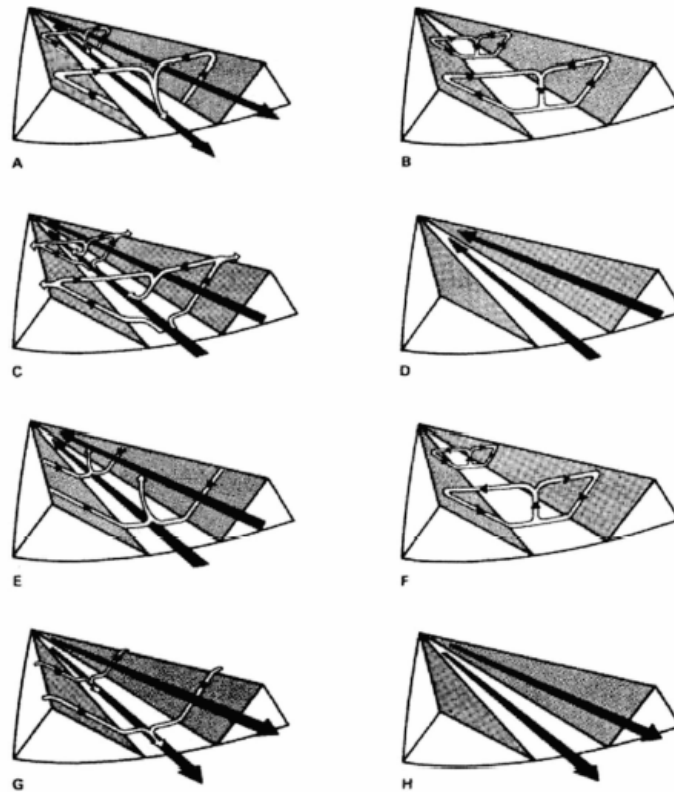


Figure 1-12. Cycle du vent de vallée dans une vallée idéalisée d’après Defant [1951;1949].

A = lever du soleil et mise en place des vents de pente (flèches blanches) ; B = bascule du vent de vallée descendant vers le vent montant (vers 9:00 HL) ; C = vents de pente moins importants et vent de vallée en place (dans l’après-midi) ; D = début de soirée, persistance du vent de vallée montant et disparition des vents de pentes ; E = soirée, mise en place des vents de pente descendant et diminution du vent de vallée ; F = bascule du vent montant vers le vent descendant et vents de pente en place en début de nuit ; G = vent de vallée descendant à plein régime en milieu de nuit ; H = les vents de pente cessent et le vent de vallée remplit la vallée en fin de nuit

L'expérience MAP est sans doute le jeu de mesures le plus complet pour la validation d'un modèle dynamique dans une vallée alpine. Les simulations réalisées par De Wekker et al. [2005] avec le modèle RAMS ont montré que la bonne description des flux de chaleur sur les pentes conditionnait l'aptitude du modèle à décrire correctement, en temps et en espace, les vents dans la vallée. Une attention particulière dans cette étude a été portée à l'initialisation de l'humidité du sol en fonction du type de sol et de l'altitude. Les effets d'ombrage ont été désignés comme une cause possible des différences entre le modèle et les mesures concernant les heures de mise en place des régimes de vent montant et descendant. La structure à trois couches illustrée grâce aux mesures des figures 1-10 et 1-11 a été observée de manière similaire à Grenoble. Cette discussion sur les systèmes de vent de vallée a montré que la simulation d'une vallée réelle est une tâche difficile. Des études de modélisation de la qualité de l'air en terrain complexe restent encore une tâche délicate et l'utilisation de modèles en trois dimensions avec des paramétrisations de la CLA adaptées aux structures stratifiées rencontrées dans les vallées est une condition sine qua non pour bien décrire le mélange vertical dans les vallées.

1.2.4. La stratosphère et ses échanges avec la troposphère

La stratosphère a été découverte par Léon Philippe Teisserenc de Bort par l'envoi de ballons sonde. Ce dernier a découvert qu'à une certaine altitude, la température de l'air augmentait avec l'altitude. Ainsi à 50 km d'altitude la température moyenne de l'atmosphère est de 271 K alors qu'elle est autour de 190 K à la tropopause vers 10 km d'altitude. L'autre différence fondamentale avec la troposphère est l'absence de mouvements verticaux. Alors que l'état de la troposphère peut évoluer en quelques heures, la stratosphère a un temps de réponse de plusieurs années. Les échanges entre la troposphère et la stratosphère sont très importants pour le climat car les espèces contenues dans la stratosphère ont un impact important sur le bilan radiatif terrestre. Par exemple, la disparition de la couche d'ozone va avoir un impact sur le rayonnement UV à la surface qui va lui-même jouer un rôle dans le développement des végétaux. Il existe plusieurs mécanismes de transport de la troposphère vers la stratosphère. Un des plus élémentaires est le système de pompe au tropique formé par les ascendances d'air chaud qui pénètrent dans la stratosphère. La figure 1-13 montre que ce mécanisme crée des passages, appelés *tropopause folds*, à travers la tropopause pour les espèces de la troposphère. Les concentrations en CO₂, N₂O et CH₄ mesurées dans la stratosphère sont les plus fortes aux tropiques à cause des intrusions troposphériques dans la stratosphère dans cette région de l'atmosphère. Une fois dans la stratosphère, les espèces sont transportées verticalement avec une vitesse maximale de 72 km an⁻¹. Il leur faut donc plusieurs années pour atteindre la stratopause. L'atmosphère alpine est régulièrement témoin des échanges stratosphère-troposphère (STE). Le programme de recherche VOTALP [Wotawa and Kromp-Kolb, 2000] a montré que l'ozone originaire de la stratosphère contribuait de manière significative aux

niveaux d'ozone mesurés dans la CLA en région alpine ou à des sites d'altitude situés dans la troposphère libre.

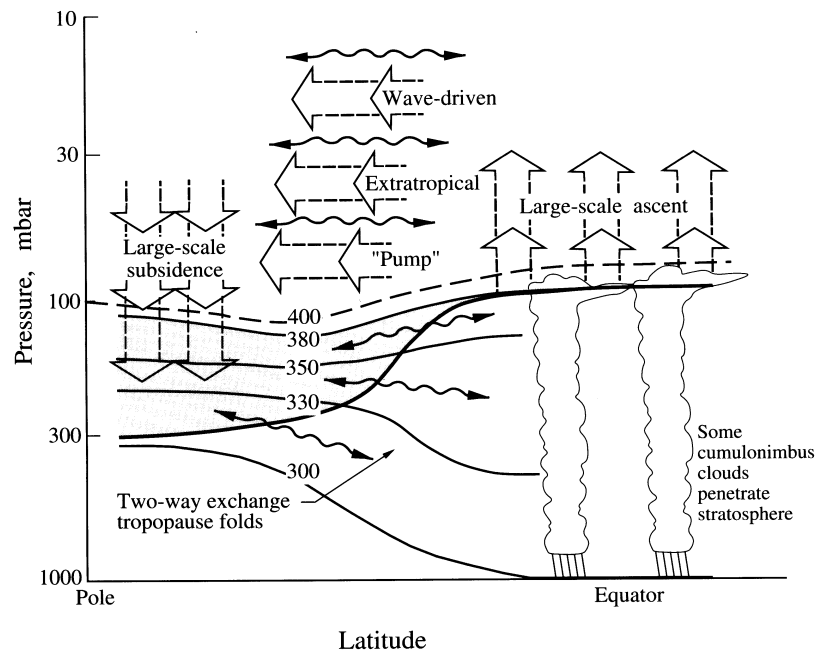


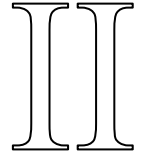
Figure 1-13. Mécanisme de pompage à l'équateur favorisant les échanges entre la troposphère et la stratosphère (*tropopause folds*) d'après [Seinfeld and Pandis, 1998]

Le chapitre 7 fournit plus de détails sur les STE et s'attache à décrire comment une intrusion d'ozone stratosphérique a influencé les concentrations d'ozone dans les Alpes en juillet 2004.

1.3. La modélisation du mélange des polluants et de la photochimie en région montagneuse

Le programme POVA a permis de développer des outils décrivant les circulations atmosphériques dans les vallées, d'abord de manière théorique [Kerbiriou, 2004] puis de manière réaliste en traitant des cas concrets [Chemel, 2006]. Le couplage du code chimique TAPOM au code dynamique ARPS a permis de comprendre les mécanismes contrôlant la photochimie dans les vallées de Chamonix et de Maurienne [Brulfert, 2005]. Le programme POVA a montré que, tout au long de l'année, les vallées étaient des consommatrices d'ozone à cause des émissions importantes de NO_x par le trafic routier et le chauffage concentrées dans les agglomérations et sur les axes routiers. Durant l'hiver, lorsque des inversions thermiques persistantes mettent un couvert au-dessus du relief, l'atmosphère des vallées est coupée de la circulation grande échelle. Dans ce cas une modélisation des apports internes (émissions) à la vallée était suffisante pour simuler le mélange et la chimie des polluants primaires tels les NO_x et les particules. En revanche, en été, l'atmosphère est mélangée sous

l’effet des vents de pente et des vents de vallée. Les concentrations en ozone au sein des vallées sont alors très liées à la production d’ozone par les agglomérations situées aux alentours et aux apports à longue distance [Brulfert, Chemel, Chaxel, and Chollet, 2005]. Afin de prendre en compte ces apports, l’outil numérique initialement utilisé s’est enrichi de modèles décrivant la météorologie et la chimie à l’échelle continentale et régionale [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005]. En 2003, les nombreuses questions posées par la photochimie dans les vallées alpines ont poussé l’équipe de modélisation à utiliser les résultats obtenus dans une autre vallée alpine plus au sud, celle de Grenoble. La fusion entre les travaux effectués dans le cadre de POVA [Chaxel, 2003] et les travaux réalisés par l’EPFL sur l’agglomération grenobloise [Couach, 2002] a abouti à un seul et même outil : PREVALP. PREVALP est une chaîne de différents modèles eulériens créée pour étudier la photochimie et le mélange des polluants en terrain montagneux. Le chapitre qui suit présente PREVALP et justifie l’utilisation de ses différents composants.



Chapitre 2. Description du système de modélisation PREVALP

La région Rhône-Alpes abrite une importante activité industrielle et sa situation géographique l'entraîne à accueillir des échanges routiers importants, pour ses besoins internes comme avec les régions avoisinantes. Elle est devenue un véritable carrefour européen pour le transport des marchandises. De plus, son profil climatique la prédispose à une sensibilité particulière de ses grands pôles urbains à la pollution de l'air, bien connue des citoyens lyonnais et grenoblois. Le programme scientifique POVA (Pollution des Vallées Alpines) a par ailleurs récemment démontré la vulnérabilité de certaines vallées alpines au trafic international. Aucun outil déterministe opérationnel de la pollution de l'air n'était jusqu'à présent disponible pour étudier le comportement de l'atmosphère de la région. Le relief très complexe formé de vallées et de massifs est une véritable gageure pour les météorologues. Dans ce contexte, développer un outil pour simuler la pollution de l'air est un réel challenge.

PREVALP est un projet commun entre le Laboratoire des Ecoulements Géophysiques Industriels (LEGI) de Grenoble et les associations agréées de surveillance de la qualité de l'air (AASQA) de la région Rhône-Alpes. Il s'agit d'un système complet de modélisation issu des recherches menées dans le cadre du programme POVA, qui doit répondre à plusieurs demandes :

1. compléter les méthodes de surveillance par métrologie fixe ou mobile ;
2. prévoir à 48h les épisodes pollués pour affiner l'alerte sanitaire et ajuster les plans d'urgence préfectoraux ;
3. réaliser des prospectives à moyen terme pour évaluer l'efficacité des stratégies techniques de réduction des émissions.

PREVALP est issu du système de modélisation utilisé dans le cadre du projet POVA [Brulfert, 2005]. L'originalité de la modélisation réalisée dans le cadre de POVA résidait dans l'emploi de différents modèles travaillant chacun à des échelles (de temps et d'espace) différentes. Cette approche multi-échelle permettait de forcer les calculs petite échelle dans les vallées avec des données réalistes grande échelle. De même, la chimie de l'atmosphère de la vallée prenait en compte de manière réaliste les contributions extérieures à la vallée comme les contributions du fond européen où des grandes agglomérations de la région.

2.1. Principe

PREVALP est une chaîne de modèles numériques eulériens sous environnement UNIX/Linux pour l'étude de la pollution de l'air. Ces modèles décrivent la dynamique de l'atmosphère et les réactions chimiques qui s'y déroulent. Ce système est multi-échelles, ce qui signifie qu'il peut être appliqué sur des régions de tailles diverses. Les domaines d'études pourront ainsi avoir une étendue de quelques kilomètres à 1000 km. La chaîne a été développée à partir des travaux de couplage entre les modèles MM5, CHIMERE, ARPS et TAPOM décrits dans les

thèses de Brulfert [2005] et Chemel [2006]. Cette chaîne a ensuite évolué pour utiliser, à la place des modèles ARPS pour la météo et TAPOM pour la chimie, le modèle Metphomod qui couple la météorologie à la chimie. Le choix d'utiliser Metphomod a été motivé par l'important travail de validation du modèle et d'analyse réalisé par Couach [2002;2003;2004] sur la région grenobloise. La finalité de PREVALP est d'obtenir un outil capable de décrire la physico-chimie de l'atmosphère à des échelles d'espace de 1 km^2 sur des territoires de quelques centaines de kilomètres et à une échelle de temps horaire sur des périodes de quelques jours à quelques mois. Les applications de cet outil sont multiples : études de processus internes aux vallées en couplage réel avec la météorologie grande échelle, étude des interactions du relief avec l'écoulement grande échelle ou applications réglementaires pour les acteurs locaux de la qualité de l'air (AASQA, pouvoirs publics, organismes de recherche).

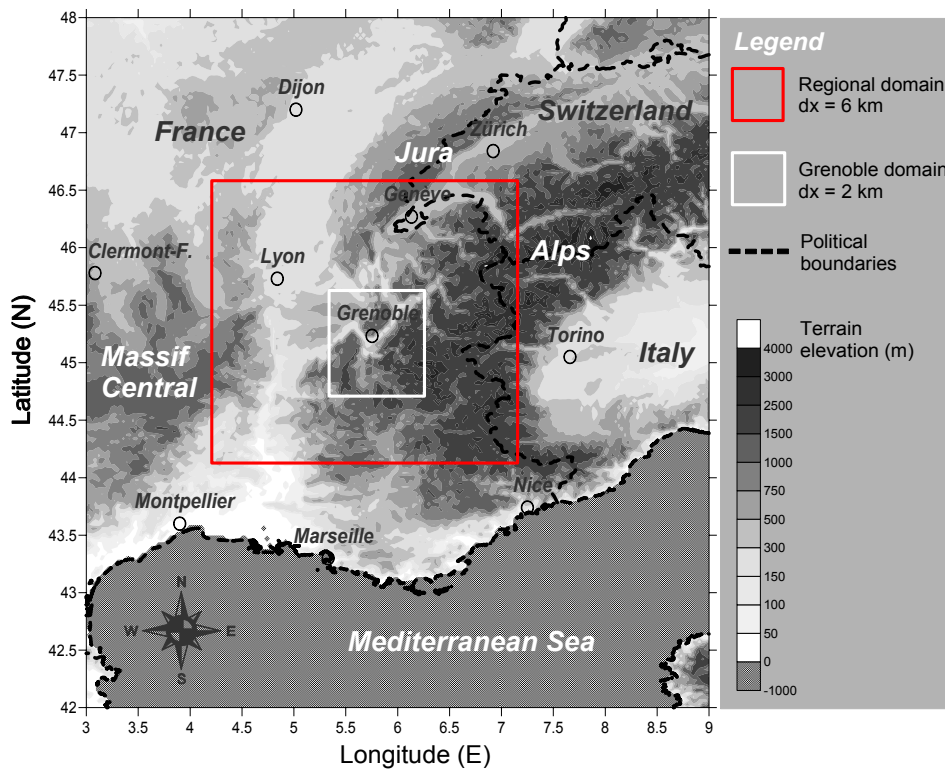


Figure 2-1. Localisation des deux domaines de calcul pour la région Rhône-Alpes ($dx = 6 \text{ km}$) et la région de Grenoble ($dx = 2 \text{ km}$)

PREVALP est basé sur trois modèles : le PSU/NCAR mesoscale model MM5 [Grell, Dudhia, and Stauffer, 1995], le modèle CHIMERE [Vautard, Beekmann, Roux, and Gombert, 2001], et MetPhoMod [Perego, 1999]. MM5 est un modèle décrivant la dynamique atmosphérique à de multiples échelles. Derrière cet acronyme se cache un système de modélisation complet comprenant un générateur de terrain, un interpolateur de données météo, un solveur dynamique, des outils post-traitement, un système d'assimilation de données et des outils de visualisation. Sa disponibilité et la simplicité d'utilisation l'ont rendu très populaire dans des

domaines très divers allant de la météorologie opérationnelle aux études de qualité de l'air. MM5 est disponible sur le site du NCAR (National Centre for Atmospheric Research, USA) à l'adresse <http://www.mmm.ucar.edu>, très documenté et très largement utilisé par la communauté scientifique, par les services météorologiques nationaux et par de nombreuses entreprises spécialisées dans l'atmosphère (ARIA, ACRI). CHIMERE est un modèle de transport et de dispersion des espèces chimiques dans l'atmosphère développé à l'IPSL (Institut Pierre Simon Laplace) basé à Paris et disponible à l'adresse <http://euler.polytechnique.fr/chimere>. CHIMERE inclut le module de chimie gazeuse réactive MELCHIOR 2 pour le calcul des concentrations chimiques de 44 espèces. CHIMERE a été utilisé pour de nombreuses études de qualité de l'air dans des projets comme ESQUIF, ESCOMPTE et plus récemment CITYDELTA. MetPhoMod est un modèle eulérien composé d'un solveur dynamique et d'un solveur chimique permettant de calculer en même temps les champs météorologiques et les concentrations en polluants gazeux. MetPhoMod inclut le module de chimie gazeuse réactive RACM pour le calcul des concentrations chimiques de 72 espèces.

Ces trois modèles eulériens (maillage en 3 dimensions) sont couplés selon une technique de *one-way nesting* : les informations aux bords d'un modèle petite échelle proviennent du calcul d'un modèle grande échelle. Les calculs sont réalisés sur des domaines d'étendue variable avec des résolutions horizontales (taille de maille) allant de 1 à 18 km selon la taille du domaine d'étude et une précision verticale variable selon le modèle et la complexité du relief. Le calcul dynamique réalisé par MM5 décrit la troposphère et le bas de la stratosphère, soit de 0 à 15000 mètres du sol, alors que CHIMERE décrit la basse troposphère jusqu'à l'altitude de 500 hPa (soit environ 5500 m). MetPhoMod décrit les 8000 premiers mètres au-dessus d'une altitude de référence. MM5 et CHIMERE ne sont pas couplés mais fonctionnent en différé (couplage *offline*). Le calcul chimique commence lorsque le calcul météorologique est achevé. MetPhoMod couple la météorologie et la chimie de manière *online* et utilise à ses frontières les sorties de MM5 pour les champs météorologiques et de CHIMERE pour les concentrations en espèces gazeuses.

2.2. Calcul régional MM5/CHIMERE

Le calcul des champs météorologiques et des concentrations en espèces gazeuses à l'échelle continentale et régionale est d'abord réalisé grâce au couplage des modèles MM5 et CHIMERE. Une description exhaustive de ce système de modélisation se trouve à <http://euler.polytechnique.fr/chimere>.

MM5 est alimenté par des données de sol provenant des bases de données de l'USGS (<http://dss.ucar.edu>) pour la topologie et l'occupation des sols. MM5 utilise en entrée des

sorties du modèle opérationnel du Centre Européen de Prévisions Météorologiques à Moyen-Terme (<http://www.ecmwf.int>) qui sont des données archivées en trois dimensions. Ces données sont obtenues depuis le système de désarchivage de données MARS, sur les serveurs du Centre Européen. Des routines de désarchivage sont dédiées à MM5 qui va directement utiliser les données de MARS en format GRIB. Pour la prévision, MM5 utilise des données du NCEP (National Center for Environmental Prediction) provenant du modèle global AVN. Ces données sont téléchargeables librement sur les serveurs américains.

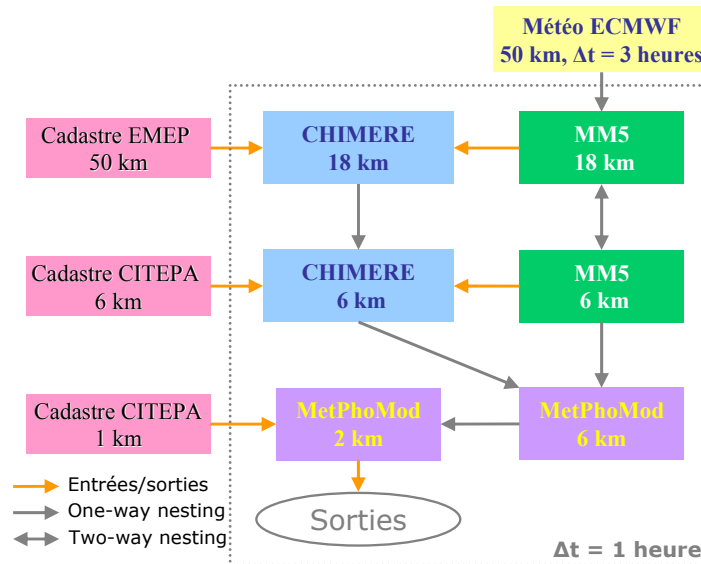


Figure 2-2. Chaîne de modèles utilisés dans le cadre du travail de thèse

CHIMERE utilise un cadastre d'émission à pas de temps variable construit grâce au module CADASTRE développé en collaboration avec Robert VAUTARD (IPSL/LMD). Le cadastre d'émission de CHIMERE est calculé à partir d'un cadastre annuel et de coefficients horaires, journaliers et mensuels d'émission pour les espèces NO_x , CO, SO_2 et COVM. CADASTRE gère les systèmes de coordonnées géographiques, UTM et Lambert Conique Conforme (annexe B.1). Les conditions initiales et les conditions aux limites de CHIMERE sont fournies par le modèle MOZART (Horowitz et al., [2003]). Les formats entrée/sortie des modèles MM5 et CHIMERE sont des fichiers binaires documentés par leurs entêtes. A chaque étape des calculs météorologiques et chimiques, les fichiers binaires peuvent être convertis au format NetCDF pour être facilement visualisés. Afin de valider MM5 et CHIMERE sur la région Rhône-Alpes, un système complet de visualisation, de validation et de post-traitement des résultats a été développé : le module VERIFS calcule des scores en comparant les sorties des modèles avec les données d'observation disponibles au sol et en altitude (annexe A.4). Les résultats sont visualisés grâce aux utilitaires Vis5D, FERRET et GMT. Ces outils permettent de réaliser des cartes en deux ou trois dimensions au format GIF, des animations au format GIF ou AVI. Des exports vers des logiciels gérant des SIG comme ArcView[®], MapInfo[®] ou encore Surfer[®] ont été également développés. Le système MM5/CHIMERE a

été conçu pour être facilement utilisé sur des domaines localisés en Europe, ainsi il a été assez facile à mettre en œuvre sur la région alpine. En effet, les deux modèles comportent des modules de création de modèles numériques de terrain et d'occupation des sols. La tâche la plus délicate est la réalisation d'un cadastre correspondant à la zone d'étude. MM5/CHIMERE a été utilisé dans le cadre de cette thèse pour forcer d'autres modèles de chimie-transport comme le système ARPS/TAPOM utilisé dans le cadre de POVA pour les vallées de Chamonix et de Maurienne [Brulfert, 2005] (ces travaux ne sont pas présentés dans le manuscrit) ou le modèle Metphomod utilisé pour les simulations présentées dans ce manuscrit.

2.2.1. Le calcul régional MM5

Présentation générale

La qualité de l'air à l'échelle régionale est contrôlée par des phénomènes à grande échelle, comme la situation météorologique synoptique ou les apports de masses d'air avec des propriétés chimiques particulières, et des phénomènes à petite échelle. Pour simuler la qualité de l'air à ces trois échelles, un système de modélisation multi-échelle de la dynamique de l'atmosphère est indispensable. Le principe d'un tel calcul est de résoudre les équations de la physique sur des grilles lâches pour les zones grande échelle et d'utiliser des grilles plus fines sur les zones d'intérêt. Ce calcul nécessite d'utiliser un certain nombre de grilles imbriquées les unes dans les autres pour, au final, utiliser une grille kilométrique ou plus fine. Le fifth-generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5) a été développé dans ce but. Le modèle est décrit par [Grell, Dudhia, and Stauffer, 1995]. MM5 peut être utilisé en mode non-hydrostatique et a la possibilité d'assimiler en quatre dimensions des données (*Four-Dimensional Data Assimilation*) provenant d'observations ou d'analyses [Stauffer and Seaman, 1994]. Un modèle adjoint à MM5 existe [Zou, Kuo, and Guo, 1995]. La technique d'imbrication ou *nesting* peut être utilisée en mode aller (*one-way*) ou aller-retour (*two-way*) sur un grand nombre de niveaux de grille. Les modules traitant de la microphysique dans MM5 possèdent des niveaux de simplification différents. Pour nos calculs, nous utiliserons un schéma microphysique qui fournit des variables pronostiques supplémentaires (pluie, eau des nuages, neige et glace).

Utilisation du modèle MM5

Dans un esprit communautaire, MM5 est facilement accessible et documenté (<http://www.ucar.edu/mm5>). MM5 est un modèle régional, ce qui signifie qu'il nécessite d'être forcé aux limites avec des données sur la verticale, sur les bords, au sol et au toit du modèle. Ces données peuvent provenir d'un modèle global ou de mesures interpolées

(radiosondage). Les principales sources de données de ce type sont les données en prévision (AVN) et réanalyse (NWP) du NCEP (National Center for Environmental Prediction) et les réanalyses et prévisions ECMWF. Les premières sont librement téléchargeables via le web tandis que les secondes peuvent être directement désarchivées si l'on dispose d'un accès au ECMWF. Les données de topologie et d'occupation du sol sont elles aussi téléchargeables librement sur internet (NOAA/USGS).

Dynamique

MM5 est un modèle non hydrostatique qui utilise l'équation de conservation de la masse compressible. Le seul terme qui est négligé dans les équations est le terme de chaleur non adiabatique dans l'équation de variation de pression. Cette absence de simplification permet d'utiliser le modèle à haute résolution. Les coordonnées horizontales sont définies dans le système Lambert conforme et les coordonnées verticales sont de type *terrain-following* σ défini par la relation (2.1).

$$\sigma = \frac{p_0 - p_t}{p_s - p_t} \quad (2.1)$$

p_0 est la pression de référence, p_t est la pression au toit du modèle et p_s la pression à la surface. Ces trois pressions dépendent d'un état de référence constant. Puisque p_t et p_s ne varient pas dans le temps, les coordonnées d'un niveau σ sont fixes dans le temps et sont entièrement déterminées par l'état de référence. La coordonnée σ peut être considérée comme une coordonnée suivant le terrain. Afin de respecter la conservation de la masse, l'équation pronostique pour les variables de masse (vapeur d'eau, eau liquide, neige) est exprimée sous forme de l'équation de continuité (2.2).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_c \frac{p^*}{\rho_0} \right) = -m^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_c \frac{u}{m} \frac{p^*}{\rho_0} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_c \frac{v}{m} \frac{p^*}{\rho_0} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(\rho_c \frac{w}{\rho_0} \frac{p^*}{\rho_0} \right) + \rho Q \frac{p^*}{\rho_0} \quad (2.2)$$

ρ_c est la teneur massique en vapeur d'eau ou en eau liquide. Le facteur d'échelle m provient de la transformation en Lambert conforme de la coordonnée horizontale, $p^* = p_s - p_t$, et ρQ un terme de production de masse non lié à l'advection. La densité de l'air de référence ρ_0 est liée à la densité de l'air ρ par la relation (2.3).

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_0(z) + \rho'(x, y, z, t) \quad (2.3)$$

Les composants du vent dans ce système sont u , v et w . L'équation de continuité est la forme la plus appropriée d'une équation pronostique puisqu'elle peut facilement être discrétisée pour conserver la masse. Le rapport de mélange $q = \rho_c / \rho$ doit être calculé en utilisant une autre équation pour la densité de masse totale ρ . MM5 utilise l'équation de continuité (2.2) avec une forme simplifiée de la loi de la thermodynamique pour formuler une équation de variation de pression (2.4).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho_c C) = & -m^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_c \frac{u}{m} C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho_c \frac{v}{m} C \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial \sigma} (p^* \mathcal{C}) \\ & + Cm^2 \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(p^* \frac{u}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(p^* \frac{v}{m} \right) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(p^* \frac{\mathcal{C}}{m^2} \right) \right] \\ & + p^* Q \end{aligned} \quad (2.4)$$

La quantité ρ n'est pas directement couplée à la divergence des flux de masse et dans ces conditions, la conservation de la masse totale n'est pas assurée. Bien que l'équation pour la teneur massique en vapeur d'eau conserve la masse, cette propriété n'est pas vérifiée pour le rapport de mélange en vapeur d'eau. Le troisième terme du membre de droite de l'équation (2.4) est un terme de divergence qui apparaît uniquement dans la version non-hydrostatique du modèle. Il est très petit mais il rend la conservation de la masse délicate. Les écarts dus à la conservation de la masse sont ressentis pour des calculs sur de petits domaines avec une haute résolution spatiale. Pour nos applications en qualité de l'air, MM5 est utilisé jusqu'à une résolution de 1 km² ce qui permet de s'affranchir des problèmes qu'occasionnent la perte de masse sur le transport des polluants.

Transport turbulent dans la PBL

Le transport turbulent dans la PBL utilise le mélange à gradient non-local décrit dans [Hong and Pan, 1996]. La figure 2-3 montre un profil typique du coefficient de mélange turbulent dans la couche limite atmosphérique (CLA).

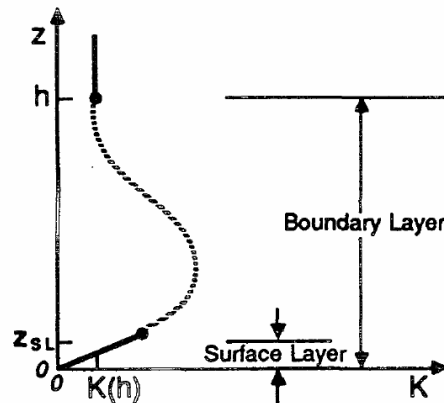


Figure 2-3. Profil typique de coefficient de mélange turbulent K . h est la hauteur de la CLA, z_{SL} est la hauteur de la couche de surface d'après [Stull, 1988]

Selon [Troen and Mahrt, 1986], l'équation de mélange turbulent pour des scalaires dans la CLA peut s'écrire sous la forme (2.5).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z \left(\frac{\partial C}{\partial z} - \gamma_c \right) \right] \quad (2.5)$$

où K_z est le coefficient de diffusivité turbulente et γ_c est une correction au gradient local qui prend en compte les tourbillons grande échelle (*large eddies*) dans le flux total. Cette correction s'applique dans la couche limite convective. Selon [Troen and Mahrt, 1986], le coefficient de diffusion pour la quantité de mouvement est défini par la formule (2.6).

$$K_{zm} = kw_s z \left(1 - \frac{z}{h} \right)^p \quad (2.6)$$

où p est la forme du profil pris à 2, k est la constante de von Kármán et z la hauteur de la CLC. L'échelle de vitesse dans la couche mélangée est calculée grâce à (2.7).

$$w_s = u_* \phi_m^{-1} \quad (2.7)$$

où u_* est la vitesse de friction et ϕ_m est la fonction de profil de vent déterminée au sommet de la couche de surface selon (2.9). Le terme de gradient non-local (ou contregradient) est donné par l'expression (2.8).

$$\gamma_c = b \frac{\overline{(w'c')}}{w_s} \quad (2.8)$$

où $\overline{(w'c')}$ est le flux de surface pour θ et q , et b est un coefficient de proportionnalité. Pour satisfaire la continuité entre le haut de couche de surface et le bas de la CLA, les fonctions de profil ϕ_m et ϕ_t dans la CLA sont les mêmes que celles utilisées dans la couche de surface.

Pour les conditions neutres et instables ($\overline{(w'\theta')} \leq 0$),

$$\phi_m = \left(1 - 16 \frac{0.1h}{L} \right)^{-1/4} \quad (2.9) \text{ pour } u \text{ et } v ;$$

$$\phi_t = \left(1 - 16 \frac{0.1h}{L} \right)^{-1/2} \quad (2.10) \text{ pour } \theta \text{ et } q ;$$

tandis que pour un régime stable ($\overline{(w'\theta')} > 0$),

$$\phi_m = \phi_t = \left(1 + 5 \frac{0.1h}{L} \right) \quad (2.11) ;$$

où h est la hauteur de la couche limite et L est la longueur de Monin-Obukhov [Monin and Obukhov, 1954]. Le sommet de la couche de surface est estimé à $0,1 h$. Selon [Troen and Mahrt, 1986], le calcul de b donne 7.8. La hauteur h est diagnostiquée par (2.12).

$$h = Ri_{cr} \frac{\theta_{virt} |U(h)|^2}{g(\theta_{virt}(h) - \theta_{surf})} \quad (2.12)$$

où Ri_{cr} est le nombre de Richardson critique, $U(h)$ est la vitesse du vent horizontal à la hauteur h , θ_{virt} la température potentielle virtuelle dans le premier niveau du modèle, $\theta_{virt}(h)$ est la température potentielle virtuelle à la hauteur h et θ_{surf} est la température proche de la surface. La diffusivité turbulente pour la température et l'humidité (K_z) est calculée à partir de K_{zm} en

utilisant le nombre de Prandlt (Pr) pris constant dans la couche de mélange et défini par (2.13).

$$\text{Pr} = \left(\frac{\phi_t}{\phi_m} + bk \frac{0.1h}{h} \right) \quad (2.13)$$

La hauteur de la couche limite h est calculée par itérations à l'aide des relations précédentes.

La paramétrisation sol/végétation à 5 niveaux

La paramétrisation turbulente décrite ci-dessus est couplée dans le modèle avec le module de sol/végétation développé par [Smirnova, Brown, and Benjamin, 1997]. Ce schéma de sol/végétation calcule la température et l'humidité du sol et détermine les flux de température et d'humidité entre le sol et l'atmosphère. Pour les surfaces avec un couvert végétal, l'évapotranspiration, l'interception et la ré-évaporation des précipitations sont prises en compte. Le modèle du sol est basé sur les équations en 1-D de la conservation de la température et de l'humidité (2.14) et (2.15).

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\gamma_s}{\rho_s L_s} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) \quad (2.14) \quad \text{et} \quad \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_\eta \frac{\partial \eta_s}{\partial z} \right) + \frac{\partial K_\eta}{\partial z} \quad (2.15)$$

où ρ_s , L_s , γ_s , D_η et K_η sont la densité du sol, la capacité de chaleur spécifique, la conductivité thermique, la diffusivité thermique et la conductivité hydraulique, respectivement. La capacité de chaleur volumique $\rho_s L_s$ du sol et les conductivités sont calculées à partir de la teneur en eau du sol. L'équilibre des flux latents et sensibles à l'interface entre le sol et l'atmosphère est exprimé dans une couche mince à la surface du sol.

Schéma de diffusion horizontale et prise en compte des effets d'ombrage

MM5 est un modèle utilisant une coordonnée de type *terrain-following*. Sur un terrain avec de fortes pentes, la diffusion horizontale calculée par le modèle sur les faces des mailles du modèle est en fait une diffusion avec une composante verticale. Zängl [2002] propose une correction au calcul de la diffusion horizontale de MM5 en calculant une diffusion dans MM5 qui respecte l'horizontale réelle. Cette paramétrisation a été testée sur le calcul MM5 présenté dans [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005]. La version 3.7 de MM5 inclut les modifications de Zängl [2002] pour la diffusion et doit être utilisée pour des simulations MM5 en terrain montagneux à des résolutions plus fines que 2 km par 2 km. La prise en compte de l'inclinaison des pentes et de l'ombrage par le relief sont également prise en compte dans cette version de MM5. L'impact de l'ombre peut être important, même en été, dans certaines vallées comme la vallée de Chamonix comme l'ont montré les tests de la version 3.7 sur la période d'observations POVA de juillet 2003. Des écarts de température de

2 K dus à l'effet d'ombrage sont simulés au-dessus des pentes de la vallée en début et fin de journée. Ces écarts de température influencent de manière importante la variation de la hauteur de la CLA diagnostiquée par MM5 sur les versants de la vallée dans la matinée et en soirée. La hauteur de CLA calculée au centre de la vallée est moins affectée. La modification de MM5 proposée par Zängl [2002] reste à être testée dans une vallée en cas hivernal lorsque l'atmosphère est stablement stratifiée et où les effets d'ombrage sont importants, particulièrement en vallée encaissée. En effet, en hiver, le fond de la vallée de Chamonix ne voit le soleil que de 11 h à 15 h HL. Pour nos simulations MM5 à 18 km et 6 km de résolution, la paramétrisation d'ombre n'est pas utile car le relief à ces résolutions est trop lissé.

Conditions de bords de MM5

La technique de *two-way nesting* a permis d'utiliser MM5 pour réaliser des simulations des écoulements sur le relief alpin [Grell, Emeis, Stockwell, Schoenemeyer, Forkel, Michalakes, Knoche, and Seidl, 2000]. Cette technique permet d'utiliser aux bords d'un domaine à maillage fin, les données d'un domaine à maillage plus large. Le calcul sur les deux domaines est réalisé en même temps et les variables calculées dans le petit domaine sont réinjectées dans le calcul sur le grand domaine. Cette technique permet de prendre en compte l'effet de phénomènes locaux sur la météorologie à plus grande échelle. Pour nos applications, cette technique paraît intéressante pour prendre en compte à grande échelle les systèmes de vent de vallée qui modifient la circulation régionale à l'échelle du massif alpin. Le grand domaine de calcul est forcé à l'aide de données météorologiques issues de modèles globaux de type AVN ou ECMWF. L'utilisation de ces données aux bords du grand domaine de calcul est réalisée avec une condition aux limites de type *sponge* ou de type *relaxation*. Pour notre calcul non hydrostatique, la condition *relaxation* est utilisée. La condition *sponge* est introduite car elle est utilisée pour le forçage aux bords de Metphomod.

La condition aux limites *sponge* est définie par l'équation (2.16).

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)_n = w(n)\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)_{MC} + (1 - w(n))\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)_{LS} \quad (2.16)$$

où α représente toute variable utilisée aux bords du grand domaine, MC traduit la tendance calculée par le modèle et LS la tendance provenant des analyses grande échelle, et n traduit la distance du bord du modèle ($n = 1$ sur le bord) avec $n = 1, 2, 3, 4$ pour les variables de centre de maille et $n = 1, 2, 3, 4, 5$ pour les variables de nœud. Les coefficients de pondération $w(n)$ pour les variables de centre de maille, valent 0.0, 0.4, 0.7 et 0.9 (compté de $n = 1$ à $n = 4$) et pour les variables de nœud, valent 0.0, 0.2, 0.55, 0.8 et 0.95 (compté de $n = 1$ à $n = 5$). Tous les autres points du domaine ont $w(n) = 1$.

La condition aux limites *relaxation* pour la variable α est donnée par l'équation (2.17).

$$\left(\frac{\partial \alpha}{\partial t}\right)_n = F(n)F_1(\alpha_{LS} - \alpha_{MC}) - F(n)F_2\Delta_2(\alpha_{LS} - \alpha_{MC}) \text{ pour } n = 2, 3, 4 \quad (2.17)$$

F décroît linéairement depuis le bord du modèle selon (2.18).

$$F(n) = \left(\frac{5-n}{3}\right) \text{ pour } n = 2, 3, 4 \text{ et } F(n) = 0 \text{ pour } n > 4 \quad (2.18)$$

et où F_1 et F_2 sont donnés par (2.19) et (2.20).

$$F_1 = \frac{1}{10\Delta t} \quad (2.19) \quad \text{et} \quad F_2 = \frac{\Delta s^2}{50\Delta t} \quad (2.20)$$

Cette méthode est utilisée pour le calcul non-hydrostatique et pour assimiler des analyses ou des observations à l'intérieur du domaine. Dans la partie non-hydrostatique du solveur, la vitesse verticale n'est pas assimilée. Cette vitesse peut varier librement sauf dans les mailles sur les bords du modèle où la condition à gradient nul est utilisée. Les variables liées à l'humidité (nuages, pluie et neige) sont fixées à zéro à l'entrée et à gradient nul en sortie, si bien que MM5 forme des nuages à l'intérieur du domaine de calcul.

Le technique de raffinement de maillage (mesh refinement)

MM5 permet d'échanger des informations entre deux domaines à maillage différent. On parlera de *Master Domain* (MD) avec un maillage large et de *Small Domain* (SD) avec un maillage plus fin. Les deux domaines ont des résolutions verticales définies de la même manière, avec le même nombre de niveaux verticaux. Le rapport des tailles des mailles horizontales est fixé dans MM5 à 3. Dans ces conditions, le pas de temps d'intégration du petit domaine est 3 fois plus petit que celui du grand domaine. Ainsi MD fournit des informations à SD à chaque pas de temps et le SD envoie des informations aux MD tous les 3 pas de temps.

L'utilisation de données d'un domaine à mailles larges (MD) aux frontières d'un domaine à mailles plus fines (SD) fait intervenir une interpolation sur une maille fine des données définies sur un maillage large. Cette interpolation conduit souvent à des instabilités importantes dues aux schémas numériques utilisés. Ces instabilités sont d'autant plus importantes dans les zones de forts gradients. Afin de supprimer ce bruit, on lisse les données issues du MD où l'on applique une diffusion importante aux bords du SD. Dans les deux cas, ces procédures peuvent aboutir à une perte d'information sur les structures fines présentes dans le calcul à mailles larges. Dans MM5, une technique d'interpolation de type *shape-preserving* (conservation de structures) est utilisée. Cette technique est décrite par [Smolarkiewicz and Grell, 1992]. Le *feedback* au grand domaine est réalisé en utilisant des techniques de lissage qui évitent les instabilités dans le grand domaine. Les techniques de filtrage utilisées dans MM5 sont décrites par [Shapiro, 1970].

Paramètres de sol

Le module de sol multicouches utilisé dans MM5 utilise des paramètres de sol tabulés en fonction du type d'occupation de sol et de la saison : hiver ou été. L'occupation du sol utilise les 24 classes définies par l'USGS. Les paramètres de sol pour chacune des classes sont fournis dans le tableau 2-1.

Tableau 2-1. Données de sol utilisées dans MM5 (données NCAR)

Vegetation Integer Identification	Vegetation Description	Albedo(%)		Moisture Avail. (%)		Emissivity (% at 9 μ m)		Roughness Length (cm)		Thermal Inertia (cal cm ⁻² K ⁻¹ s ^{-1/2})	
		Sum	Win	Sum	Win	Sum	Win	Sum	Win	Sum	Win
1	Urban	18	18	10	10	88	88	50	50	0.03	0.03
2	DryIrd Crop. Past.	17	23	30	60	92	92	15	5	0.04	0.04
3	Irrg. Crop. Past.	18	23	50	50	92	92	15	5	0.04	0.04
4	Mix. Dry/Irrg.C.P.	18	23	25	50	92	92	15	5	0.04	0.04
5	Crop./Grs. Mosaic	18	23	25	40	92	92	14	5	0.04	0.04
6	Crop./Wood Mosc	16	20	35	60	93	93	20	20	0.04	0.04
7	Grassland	19	23	15	30	92	92	12	10	0.03	0.04
8	Shrubland	22	25	10	20	88	88	10	10	0.03	0.04
9	Mix Shrb./Grs.	20	24	15	25	90	90	11	10	0.03	0.04
10	Savanna	20	20	15	15	92	92	15	15	0.03	0.03
11	Decids. Broadlf.	16	17	30	60	93	93	50	50	0.04	0.05
12	Decids. Needlf.	14	15	30	60	94	93	50	50	0.04	0.05
13	Evergm. Braodlf.	12	12	50	50	95	95	50	50	0.05	0.05
14	Evergm. Needlf.	12	12	30	60	95	95	50	50	0.04	0.05
15	Mixed Forest	13	14	30	60	94	94	50	50	0.04	0.06
16	Water Bodies	8	8	100	100	98	98	.01	.01	0.06	0.06
17	Herb. Wetland	14	14	60	75	95	95	20	20	0.06	0.06
18	Wooded wetland	14	14	35	70	95	95	40	40	0.05	0.06
19	Bar. Sparse Veg.	25	25	2	5	85	85	10	10	0.02	0.02
20	Herb. Tundra	15	60	50	90	92	92	10	10	0.05	0.05
21	Wooden Tundra	15	50	50	90	93	93	30	30	0.05	0.05
22	Mixed Tundra	15	55	50	90	92	92	15	15	0.05	0.05
23	Bare Grnd. Tundra	25	70	2	95	85	95	.10	5	0.02	0.05
24	Snow or Ice	80	82	95	95	95	95	0.01	0.01	0.05	0.05
25	No data										

Définition des domaines

Afin de prendre en compte les interactions entre le relief et la circulation synoptique, MM5 est utilisé en mode *two-way nesting*. Ce mode impose de définir des domaines imbriqués avec des tailles de maille qui sont divisées par 3 dans chaque direction horizontale d'un domaine à un autre. Afin de disposer d'un forçage météorologique à bonne résolution sur la région Rhône-Alpes, il a été décidé d'utiliser une maille de 6 km de côté. En appliquant le rapport de 3, le grand domaine de calcul de MM5 possède donc une maille de 18 km de côté. Un petit domaine de calcul centré sur Grenoble a été également défini afin de tester le modèle CHIMERE à fine résolution sur la région grenobloise. Les dimensions des différents domaines MM5 sont fournies dans le tableau 2-2. La localisation géographique des frontières

des trois domaines est donnée sur la figure 2-4. Le grand domaine de calcul est destiné à décrire la situation synoptique et à l'intérieur de ce domaine, l'assimilation de données en 4 dimensions est réalisée avec une fréquence d'une analyse toutes les 6 heures. Le domaine à maille 6 km est destiné à décrire des circulations influencées par le relief des Alpes et du Massif Central. Le petit domaine à maille de 2 km de côté n'a pas été utilisé systématiquement pour nos simulations. Il est néanmoins destiné à décrire avec plus de précision les régimes de vent de vallée.

Tableau 2-2. Résolution et taille des domaines MM5 utilisés les données ECMWF

Domaine	Nom	Résolution horizontale	Résolution verticale	NX	NY
D1	MM5FRA18KM	18 km	27 niveaux	76	76
D2	MM5RA6KM	6 km	27 niveaux	70	70
D3	MM5GRE2KM	2 km	27 niveaux	70	70

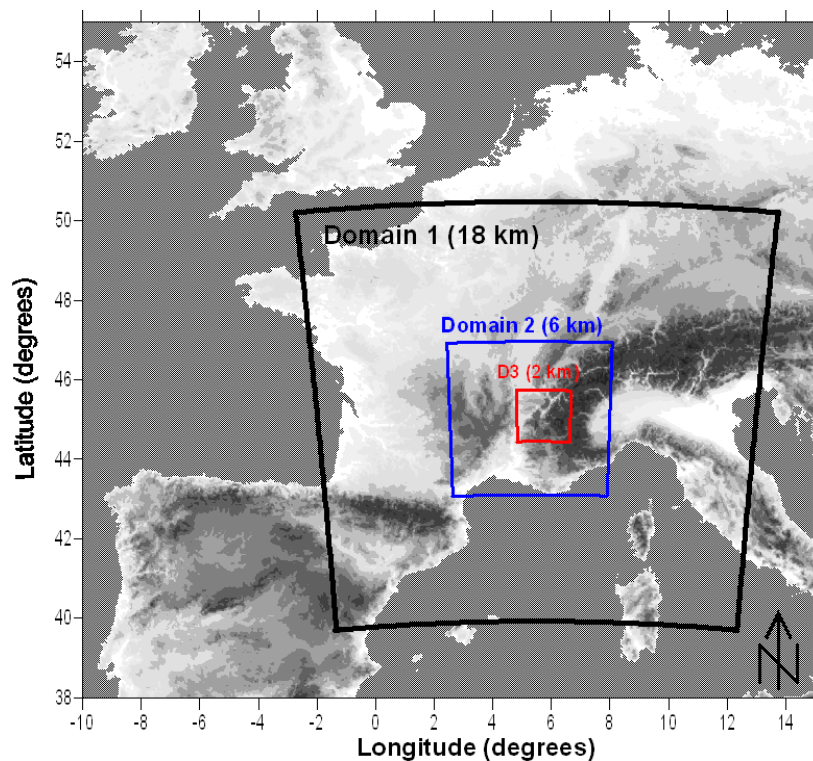


Figure 2-4. Domaines MM5 utilisés pour le calcul météorologique

Les travaux de Couach [2002] ont montré qu'un modèle régional avec une résolution horizontale de 2 km permettait de décrire avec une bonne précision les régimes de vent de vallée dans la région grenobloise. Etant donné les besoins en calcul assez important de MM5, nous n'avons pas réalisé de calcul à des résolutions plus fines que 2 km dans la région grenobloise. Une résolution de 1 km a néanmoins été testée sur 4 journées de juillet 1999 et a été évaluée à l'aide de données expérimentales provenant d'un radar profileur de vent UHF.

Le calcul à maille de 1 km de côté nécessitait l'utilisation de 4 domaines de calcul à mailles de 27, 9, 3 et 1 km de côté, respectivement.

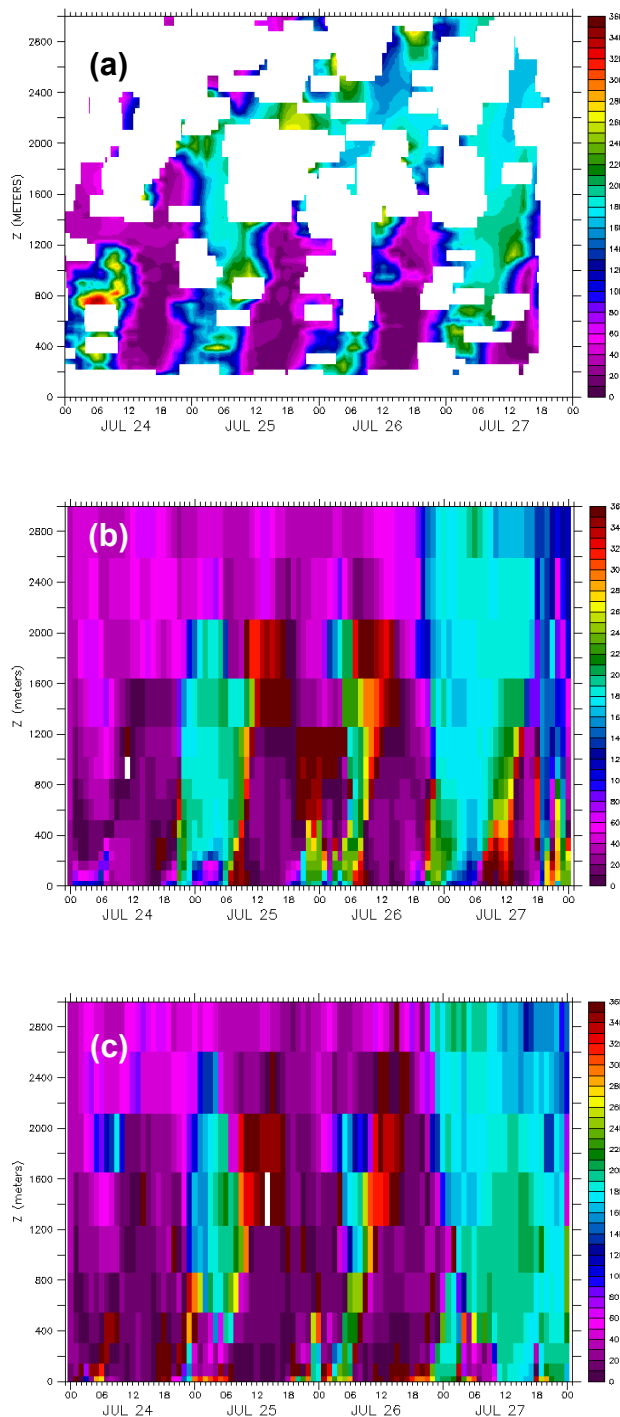


Figure 2-5. Direction du vent horizontal mesurée à Vif du 24 au 27 juillet 1999 (a), simulée à l'aide d'un domaine MM5 à maille de 1 km de côté (b) et simulée à l'aide d'un domaine MM5 à maille de 2 km de côté (c)

Les profils de vent obtenus à résolution 1 km et 2 km étaient très semblables comme le montre la figure 2-5. Néanmoins, le domaine à résolution 2 km décrivait mieux le vent dans les basses couches lors de la journée du 27 juillet 1999. Le domaine à résolution 1 km ne permettait pas d'observer une bascule de vent de vallée très nette le 27 juillet. Il est courant de penser que des calculs à résolution plus fine fournissent de meilleurs résultats en terrain complexe. Ceci est vrai si les phénomènes dominant la dynamique locale sont dus à la topographie locale. Dans le cas du 27 juillet 1999, le vent synoptique de sud joue un grand rôle dans les circulations atmosphériques de la vallée. Cet exemple montre que selon les tailles de domaine utilisées pour décrire les circulations aux échelles synoptique et régionale, les résultats à l'échelle locale peuvent être très différents. Le cas du 27 juillet 1999 est un cas complexe qui sera traité avec plus de détails dans la partie 3.1.

Des calculs à des résolutions de 1 km et de 500 m ont été réalisés avec MM5 sur la vallée de Chamonix et sont décrits dans [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005]. Le calcul à résolution de 500 m a montré les limites de MM5 dans la description de la CLA. A ces résolutions, MM5 semble résoudre explicitement des structures prises en

compte par le schéma de CLA et des circulations parasites apparaissent au sol. Après cette expérience, il a été décidé de ne plus utiliser MM5 à des résolutions inférieures au kilomètre.

Configuration de MM5

Pour toutes nos simulations, nous utilisons la version 3.6.1 de MM5 datant de mars 2003 avec les schémas physiques et les paramètres suivants :

- calcul en mode non-hydrostatique ;
- utilisation du *Four-Dimensionnal Data Assimilation* (FDDA) pour les analyses en 3 dimensions (**FDDAGD=1** et **FDDAOBS=0**) dans le domaine MM5FRA18KM seulement ;
- microphysique : Schulz pour les domaines MM5FRA18KM et MM5RA6KM (**IMPHYS=5**) ;
- paramétrisation cumulus convective : Grell (pour les domaines MM5FRA18KM et MM5RA6KM) (**ICUPA=3**) ;
- schéma de CLA : schéma MRF (**IBLTYP=5**) pour les domaines MM5FRA18KM et MM5RA6KM ;
- schéma de sol : modèle de sol à 5 couches (**ISOIL=1**) ;
- radiation : *simple cooling* (**FRAD=1**) pour le domaine MM5FRA18KM, aucun pour le domaine à MM5RA6KM (**FRAD=0**) ;
- pas de convection peu profonde (**ISHALLO=0**)

Les fichiers de configuration de MM5 (*configure.user* et *mm5.deck*) sont fournis en annexe B.1.

2.2.2. Le modèle CHIMERE

Une des questions associées au travail de thèse était de savoir comment se comporterait le modèle CHIMERE appliqué au cas d'une topologie montagneuse complexe. Une fois le modèle configuré pour la région Rhône-Alpes, il était intéressant de valider les résultats sur des cas d'étude tel la canicule de l'été 2003 comme il a été fait avec le même modèle à plus grande échelle [*Vautard, Honoré, Beekmann, and Rouil, 2005*].

Description du modèle

CHIMERE est un modèle déterministe d'étude de la qualité de l'air à l'échelle continentale et mésoéchelle qui compte, à l'image de MM5, de plus en plus d'utilisateurs. En effet, il est utilisé par l'INERIS dans le cadre du projet PREV'AIR (<http://www.prevoir.org>) pour réaliser chaque jour des prévisions sur les concentrations dans la couche de surface pour de nombreux polluants, dont l'ozone, les poussières et le dioxyde d'azote. CHIMERE est également utilisé

dans de nombreuses AASQA avec des versions régionales pour la prévision d'épisodes de pollution. C'est par exemple le cas à Paris, Lyon, Strasbourg ou Marseille. En plus d'être utilisé en prévision CHIMERE est de plus en plus employé pour des travaux de recherches sur les processus de transport et de réactions chimiques dans l'atmosphère et cela dans des domaines très variés. Il a été utilisé pour étudier l'évolution des aérosols en Afrique [Menut, Schmechtig, Marticorena, Chatenet, Chiapello, and Moulin, 2004] et va bientôt être testé en Chine. Une version du modèle incluant la technique du *one-way nesting* a permis de l'utiliser sur des domaines plus petits que sa version continentale d'origine [Schmidt, Derognat, Vautard, and Beekmann, 2001]. Les programmes de recherche tels ESQUIF [Vautard, Martin, Beekmann, Friedrich, Jaubertie, Kley, Lattuati, Moral, Neininger, and Theloke, 2003] ou ESCOMPTE [Coll, Pinceloup, Perros, Laverdet, and Le Bras, 2004] ont bénéficié des simulations réalisées à des résolutions horizontales de quelques kilomètres.

La version la plus récente de CHIMERE utilise le modèle MM5 pour le calcul dynamique. Le système de modélisation régionale MM5/CHIMERE est capable, en théorie, d'être utilisé sur des domaines n'importe où en Europe avec des mailles allant de 1 km à plusieurs dizaines de kilomètres. CHIMERE a été développé avant tout comme un modèle utilisé en opérationnel pour la prévision et a ainsi dû être optimisé pour limiter le temps de calcul. La dernière version de CHIMERE propose une meilleure description de la couche limite que la version continentale précédente grâce à l'utilisation d'un plus grand nombre de niveaux verticaux. Par rapport à d'autres modèles de chimie/transport, CHIMERE a l'avantage de posséder un module radiatif prenant en compte la couverture nuageuse. Il peut ainsi être utilisé avec une relative confiance dans un éventail plus large de situations météorologiques et s'est imposé comme le modèle opérationnel en France dans le cadre du projet PREV'AIR.

Mécanisme chimique MELCHIOR 2

CHIMERE utilise le mécanisme MELCHIOR 2 qui est une version simplifiée de MELCHIOR [Derognat, 1998]. Les espèces chimiques gérées par MELCHIOR 2 sont au nombre de 44 et 116 réactions chimiques vont intervenir dans le calcul des concentrations. Les espèces chimiques sont listées dans le tableau 2-3. La version continentale de CHIMERE antérieure à 2003 était incapable de fournir des résultats satisfaisants pour la prévision de la pollution photochimique en régions montagneuses, notamment à cause d'une résolution trop grossière selon la verticale et l'horizontale. Malgré des interpolations, l'utilisation des champs météorologiques ECMWF, dont la résolution est le demi degré en longitude et latitude, ne permettait pas de décrire les circulations atmosphériques complexes dans les vallées. Les versions de CHIMERE postérieures à 2003 utilisant MM5 se révèlent être des atouts déterminants pour la modélisation de la pollution dans les reliefs complexes car elles permettent d'accéder à des simulations à l'échelle régionale adaptées à l'échelle des vallées,

typiquement 6 km. De plus CHIMERE est utilisable dans un large panel de situations météorologiques aussi bien estivales qu'hivernales. Sa rapidité de calcul permet de le fondre facilement dans une chaîne de prévision avec MM5 qui lui aussi est dédié à la prévision.

Tableau 2-3. Liste des espèces du mécanisme MELCHIOR 2 d'après [Derognat, 1998]

<i>Composés non-organiques</i>		<i>Hydrocarbures</i>	
O3	ozone	CH4	methane
H2O2	hydrogen peroxide	C2H6	ethane
OH	hydroxy radical	NC4H10	n-butane
HO2	hydroperoxy radical	C2H4	ethene
NO	nitric oxide	C3H6	propene
NO2	nitrogen dioxide	OXYL	o-xylene
NO3	nitrogen trioxide	C5H8	isoprene
N2O5	dinitrogen pentoxide	APINEN	α -pinene
HONO	nitrous acide		
HNO3	nitric acide		
CO	carbon monoxide		
SO2	sulfur dioxide		
H2O	water		
O2	oxygen		
M	air molecule		
<i>Composés nitrés organiques</i>		<i>Carbonyles</i>	
PAN	peroxyacetyl nitrate	HCHO	formaldehyde
CARNIT	carbonyle nitrate comme -nitrooxy acetone	CH3CHO	acetaldehyde
ISNI	nitrate insaturé de la dégradation de C5H8	CH3COE	methyl ethyl ketone
		GLYOX	glyoxal
		MGLYOX	methyl glyoxal
		CH3COY	dimethyl glyoxal
		MEMALD	dicarbonyles insaturés
		MVK	methyl vinyl ketone
		MAC	methacroleine
<i>Radicaux (per)oxy</i>		<i>Peroxides organiques</i>	
CH3O2	radical methyl peroxy	CH3O2H	methyl hydroperoxide
CH3CO	radical peroxy acetyl	PAA	peroxy acetyl acid
<i>Opérateurs</i>			
oRO2	radicaux peroxy issus de l'attaque de OH sur C2H5, NCHH10, C2H4, C3H6, OXYL, CH3COE, MEMALD, et MVK	oRCO3	peroxydes organiques issus de la photolyse de MACR +OH et MEMALD
oROOH	peroxydes organiques issus de ORO2+HO2	oPAN	composés homologues à PAN
oRO2b	radicaux peroxy issus de C5H8 et APINEN + OH	oRCO3H	peroxydes organiques issus de ORO3+HO2
oROOHb	peroxydes organiques issus de ORO2b+HO2 et ORO2b+ORO2b	oRO2NI	radicaux peroxy nitrate organique de l'attaque de NO3 sur C2H4, C3H6, C5H8, APINEN et de OH sur ISNI

Mélange vertical dans CHIMERE

Le mélange vertical des polluants dans CHIMERE est calculé en utilisant des coefficients de diffusivité turbulente calculés grâce à la paramétrisation de Troen et Mahrt [1986]. On se reportera à la description du mélange vertical dans MM5 pour le détail du calcul. La diffusivité turbulente K_z est diagnostiquée à partir de la hauteur de la CLC. La hauteur de CLC est diagnostiquée en utilisant deux méthodes. Dans le cas stable, on détermine à quelle

hauteur le nombre de Richardson Ri prend la valeur du nombre de Richardson critique Ri_{cr} . Dans le cas instable, on détermine à quelle hauteur le flux de chaleur dans l'atmosphère s'annule. La hauteur h de la CLA est augmentée de la hauteur des nuages en sommet de CLA. Les coefficients de diffusion K_z dans la CLA sont calculés de manière analogue à MM5 selon (2.21).

$$K_z = kw_s z \left(1 - \frac{z}{h}\right)^p \quad (2.21)$$

avec l'indice p prenant la valeur 3, contre 2 dans la paramétrisation de MM5. Au-dessus de la CLA, la diffusion dans les nuages est prise en compte.

Définition des domaines de CHIMERE

Afin de décrire correctement les échelles continentales et régionales, nous décidons d'utiliser deux domaines CHIMERE avec des pas de maille de 18 et 6 km (figures 2-6 et 2-7).

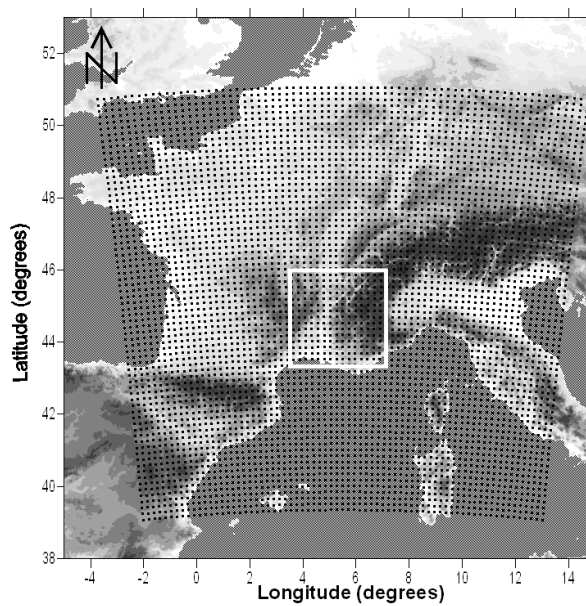


Figure 2-6. Centres des mailles du domaine FRA18KM avec l'emplacement approximatif du domaine RA6KM (carré blanc)

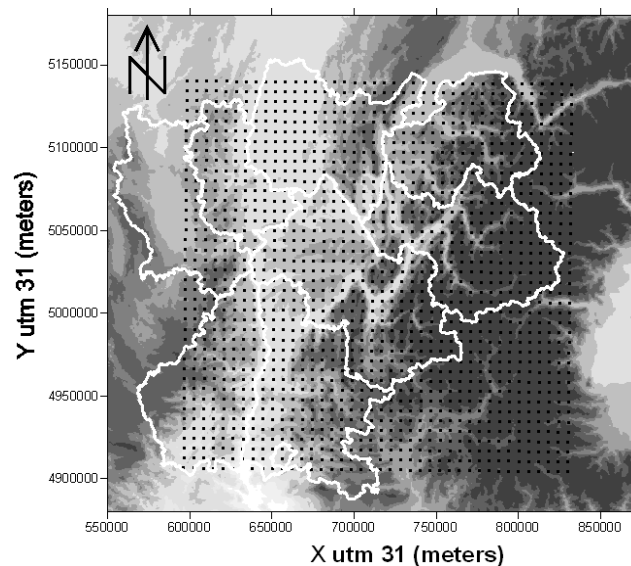


Figure 2-7. Centres des mailles du domaine RA6KM avec les limites administratives de la région Rhône-Alpes (lignes blanches)

La maille de 18 km est bien adaptée à la description de la pollution photochimique à l'échelle de la France alors que la maille de 6 km est adaptée à l'étendue de la région Rhône-Alpes. Le cadastre régional du CITEPA utilisé dans les simulations a également une maille de 6 km. L'utilisation de CHIMERE à cette échelle permet de prendre en compte des phénomènes, comme l'effet des nuages sur la production d'ozone. Pour définir le domaine CHIMERE à maille de 18 km (FRA18KM) qui correspond à un domaine centré sur les Alpes (figure 2-6), nous utilisons le domaine de MM5 à mailles de 18 km (MM5FRA18KM) de la figure 2-4

auquel nous enlevons deux mailles sur les bords. Les émissions sont ensuite calculées sur ce maillage à partir de l’inventaire EMEP (voir la partie 2.5 sur la génération des fichiers d’émissions). Pour définir le domaine CHIMERE à mailles de 6 km (RA6KM) de la figure 2-7, nous utilisons le domaine sur lequel le cadastre CITEPA a été réalisé à la différence que nous agrandissons le domaine à pas de mailles de 6 km du CITEPA en ajoutant 3 mailles sur les bords de la grille en coordonnées Lambert 2 étendu sur laquelle est réalisée l’inventaire du CITEPA. Cela revient à agrandir le domaine de 18 km sur les bords. Les niveaux du modèle sont définis selon la formule $P_k = a_k 10^5 + b_k P_{surf}$ où P_{surf} est la pression de surface et a_k et b_k sont donnés dans le tableau 2-4.

Tableau 2-4. Coefficients a_k et b_k utilisés pour définir les niveaux verticaux de CHIMERE

k	a_k	b_k	Altitude moyenne au-dessus d’une plaine ($P_{surf}=1000$ hPa)
1	0.000	0.99500	40
2	0.00861	0.97786	110
3	0.02330	0.94863	228
4	0.04835	0.89878	435
5	0.09107	0.81378	800
6	0.16391	0.66881	1465
7	0.28814	0.42160	2740
8	0.50000	0.00000	5540

Le modèle CHIMERE dans sa version multi-échelle (postérieure à 2003) permet de fixer un toit plus haut que dans la précédente version continentale. Le toit du modèle était alors limité à 700 hPa ce qui correspond à une altitude légèrement supérieure à 3000 m. Avec un toit de modèle à 500 hPa, l’emploi de CHIMERE à des résolutions où le relief du modèle dépasse 4000 m est possible (on pense évidemment à la région du Mont-Blanc dont le sommet culmine à 4810 m). L’utilisation du modèle CHIMERE dans la chaîne PREVALP est la première utilisation du modèle CHIMERE en terrain montagneux. L’utilisation de CHIMERE dans le cadre du programme ESCOMPTE se limitait à son emploi à un terrain complexe à faible altitude (inférieure à 2500 m).

2.3. Calcul MetPhoMod sur les domaines locaux

Le modèle METPHOMOD (METeorology and PHOtochemistry MODEL) est un modèle Eulérien tridimensionnel pronostique pour la simulation de la pollution photochimique estivale [Perego, 1996;Perego, 1999]. Il est composé de plusieurs modules pour traiter la dynamique atmosphérique, la turbulence, le transport, la chimie en phase gazeuse, le transfert radiatif à courte et longue longueur d’onde et l’interaction avec la surface, incluant les émissions et la déposition des gaz. Metphomod permet de calculer l’évolution de la

distribution spatiale et temporelle des champs météorologiques et les concentrations de nombreuses espèces chimiques de quelques centaines de mètres à plusieurs centaines de kilomètres à l'horizontale et d'atteindre la tropopause en limite verticale. Metphomod est un modèle utilisé à plusieurs reprises en Suisse pour étudier la climatologie et la photochimie sur le plateau suisse. Schneider et al. [2004] ont utilisé Metphomod pour évaluer l'impact du changement de l'occupation du sol entre 1850 à nos jours sur les températures et l'humidité sur le plateau Suisse.

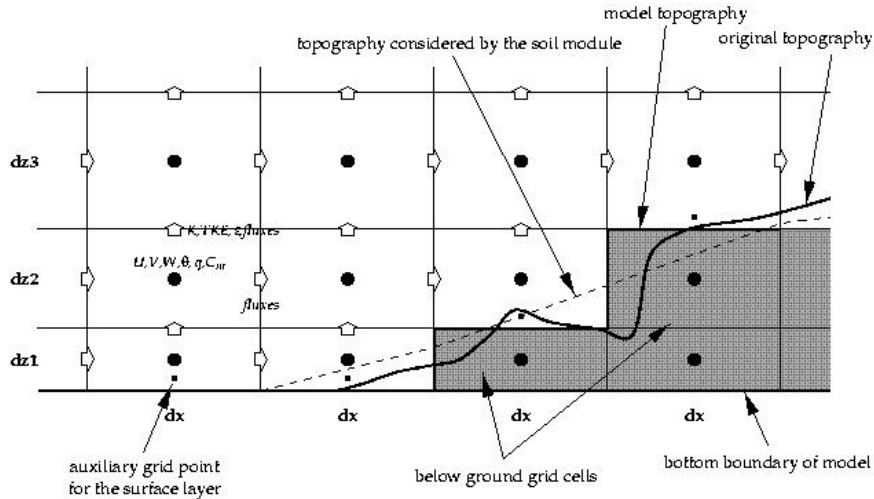


Figure 2-8. Maillage cartésien utilisé par METPHOMOD d'après [Perego, 1999]

Metphomod utilise une grille cartésienne avec un système de coordonnées rectangulaires (figure 2-8). Avec cette structure de grille, la plupart des paramètres physiques sont stockés au centre des cellules. Seuls les paramètres de turbulence et les flux sont stockés sur les faces des cellules. Ils sont calculés à partir des interactions avec les 6 cellules voisines régies par des équations de Navier-Stokes simplifiées (2.22).

$$\frac{\partial \rho_0 \bar{u}_i}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{u}_j \rho_0 \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\overline{u_j'' \rho_0 \partial u_i''}}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}'}{\partial x_i} - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j \rho_0 \bar{u}_0 - \delta_{i3} \rho_0 g \left(\frac{\theta'}{\theta_0} - \frac{c_v p'}{c_p p_0} \right) \quad (2.22)$$

avec :

A_0 est la valeur synoptique de la variable A

\bar{A} est la moyenne de la variable A sur le volume de la cellule considérée

$$A' = A - A_0$$

$$A'' = A - \bar{A}$$

p est la pression de l'air

u_i est la composante i de la vitesse horizontale \mathbf{u}

Ω_i la composante i du vecteur de rotation terrestre $\mathbf{\Omega}$

c_p la capacité calorifique de l'air à pression constante

c_v la capacité calorifique de l'air à volume constant

A ceci, il faut encore rajouter les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de la chaleur, de la vapeur d'eau, des composés chimiques, l'approximation anélastique et la loi des gaz parfaits pour avoir un système d'équations complet. La figure 2-8 montre la structure de la grille cartésienne. Sur cette figure U , V et W sont les 3 composantes du vent, θ la température potentielle virtuelle de l'air, q la quantité de vapeur d'eau, C_m la concentration de l'espèce chimique m , K la diffusivité turbulente, TKE l'énergie cinétique sous maille et ε le taux de dissipation turbulente. Pour ce type de grille, la longueur des cellules sur les axes x et y est constante sur tout le maillage, alors que pour z , la hauteur des couches varie avec l'altitude afin d'obtenir une bonne précision près du sol et limiter le temps de calcul pour les couches qui se trouvent à des hauteurs élevées. Le modèle considère une topographie différente pour le module qui prend en compte les interactions avec le sol et pour le module qui traite de la dynamique atmosphérique (figure 2-8). Cette description du sol tire profit des avantages d'un sol de type *terrain-following* pour ce qui est du rayonnement et des flux entre le sol et l'atmosphère tout en autorisant la présence de murs et de canyons. On verra à la fin de ce chapitre comment le maillage du modèle Metphomod permet de mieux prendre en compte qu'un maillage type *terrain-following* la topographie de la région grenobloise qui comporte de nombreuses falaises verticales [Duhaut and Vigier, 2001].

Ce modèle peut utiliser différents mécanismes chimiques comme par exemple les mécanismes chimiques RADM [Stockwell, Middleton, Chang, and Tang, 1990] et RACM [Stockwell, Kirchner, Kuhn, and Seefeld, 1997].

Mélange vertical dans Metphomod

Metphomod considère que le mélange vertical intervient dans trois régions. Dans les premiers centimètres au-dessus du sol, la diffusivité moléculaire domine les autres processus de mélange. Dans la couche de surface, les premiers mètres influencés par le sol, la théorie de Monin-Obukhov [Monin and Obukhov, 1954] est appliquée et les flux latents, sensibles et d'espèces gazeuses entre le sol et l'atmosphère sont calculés en utilisant les paramétrisations de Businger et al. [1971]. Pour le calcul des flux, Metphomod utilise un point situé à 10 m du sol dans nos simulations. Le reste du domaine du modèle est réparti entre la CLA et la TL. Dans ces régions, deux schémas de fermeture turbulente sont disponibles. Nous présentons dans la suite le schéma $k-\varepsilon$ [Apsley and Castro, 1997] que nous avons utilisé dans nos simulations. Ce schéma calcule l'énergie cinétique turbulente (TKE) et le coefficient de dissipation turbulente ε selon des équations différentielles (2.23) et (2.24).

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \nabla \cdot \bar{U}E - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K}{\sigma_E} \frac{\partial E}{\partial z} \right) + P - \varepsilon \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \nabla \cdot \bar{U}\varepsilon - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) + \frac{\varepsilon}{E} (C_{\varepsilon 1} P - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) \quad (2.24)$$

où P , le terme de production de TKE, est la somme (2.25) de production d'énergie par le cisaillement de vent S (2.26) et la flottabilité B (2.27).

$$P = S + B \quad (2.25)$$

$$S = K \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \quad (2.26)$$

$$B = -K \frac{g}{\rho_0 \sigma_\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (2.27)$$

La diffusivité turbulente K_z est calculée selon (2.28).

$$K_z = \frac{c_\mu E^2}{\varepsilon} \quad (2.28)$$

Ces coefficients K_z sont utilisés pour résoudre l'équation de diffusion sur la verticale (2.29) à l'aide d'un schéma implicite.

$$\overline{w''A''} = -K_z \frac{\partial \bar{A}}{\partial z} \quad (2.29)$$

où $w''A''$ est le flux turbulent vertical du scalaire A . Les différentes constantes dans les équations qui précèdent sont identiques à celles utilisées dans [Apsley and Castro, 1997], soit : $c_\mu = 0.09$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_E = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.11$, $\sigma_\theta = 0.9$

L'intérêt du schéma k- ε par rapport au schéma de gradient non local [Hong and Pan, 1996] décrit pour MM5 ou la paramétrisation de coefficient de diffusion turbulente K_z calculée par CHIMERE [Troen and Mahrt, 1986] est que le calcul des coefficients de diffusion turbulente K_z n'est pas dépendant d'une estimation de la hauteur de la CLC. En effet cette grandeur est très difficile à estimer en terrain montagneux. Le calcul de K_z à partir de TKE permet de décrire de manière précise la turbulence générée par cisaillement entre les différentes couches observées dans les vallées (et décrites dans la partie 1.2.2). Une autre paramétrisation disponible dans Metphomod basée sur un mélange non local [Stull, 1988] décrit mal les stratifications complexes de l'atmosphère ou les situations fortement convectives [Perego, 1999].

Déposition sèche

La déposition sèche est un processus déterminant dans la chimie de l'atmosphère car elle représente un puits important pour de nombreuses espèces gazeuses dans l'atmosphère, en premier lieu les espèces non solubles dans l'eau. Pour l'ozone troposphérique, la déposition sèche est le puits le plus important. De nombreuses mesures ont été réalisées dans le passé sur différentes surfaces et à différentes saisons [Wesely and Hicks, 1977]. La déposition sèche dans les modèles numériques est souvent paramétrée à l'aide d'une vitesse de déposition v_D . Le taux de déposition D est calculé à l'aide de cette vitesse de déposition v_D et de la

concentration C en l'espèce gazeuse dans la première maille au-dessus du sol selon la relation (2.30).

$$D = v_D C \quad (2.30)$$

Dans Metphomod, la vitesse de déposition v_D est prise égale à l'inverse de la résistance R . Cette résistance R est définie comme la somme de trois résistances (2.31).

$$R = R_a + R_b + R_c \quad (2.31)$$

R_a est la résistance aérodynamique associée à la turbulence atmosphérique, R_b la résistance quasi-laminaire (de sol ou de feuilles) dans la couche limite et R_c la résistance de surface qui dépend de facteurs physiques, physiologiques et biochimiques.

La résistance aérodynamique est calculée dans metphomod par (2.32) où z est la hauteur du point de grille dans la couche de surface du modèle (10 m dans nos simulations), z_0 la hauteur de rugosité, k la constante de Von Kármán (prise à 0,4), u_* la vitesse de friction calculée à partir du flux de vitesse ($u_* = \sqrt{-u'w'}$), L la longueur de Monin-Obukhov [Monin and Obukhov, 1954], et $\Psi_H(z/L)$ la fonction de stabilité calculée à l'aide de la paramétrisation de Businger et al. [1971].

$$R_a = \frac{\ln(z/z_0) - \Psi_H(z/L)}{ku_*} \quad (2.32)$$

La résistance quasi-laminaire R_b est calculée à l'aide du modèle de [Wesely and Hicks, 1977] selon la formule (2.33).

$$R_b = \frac{2k}{u_*} \left(\frac{\kappa}{D_C} \right)^{2/3} \quad (2.33)$$

κ est la diffusivité thermique de l'air et D_C la diffusivité thermique de l'espèce C .

Pour calculer la résistance de la canopée R_c , le modèle de [Arritt, Pielke, and Segal, 1988] est utilisé. Les valeurs minimums $R_{c,\min}$ et maximums $R_{c,\max}$ de la résistance sont tabulées et les variations en présence de lumière sont calculées en fonction de la radiation globale R_G selon les relations (2.34).

$$R_c = \begin{cases} R_{c,\max} & R_G = 0 \\ R_{c,\min} + (R_{c,\max} - R_{c,\min}) [1 - (R_G/400)]^{1/3} & 0 < R_G < 400 \\ R_{c,\min} & R_G \geq 400 \end{cases} \quad (2.34)$$

On définit une résistance pour les surfaces humides $R_{c,wet}$ et une résistance pour la nuit $R_{c,night}$. Les valeurs de $R_{c,\min}$, $R_{c,\max}$ et $R_{c,night}$ sont tabulées en fonction de l'occupation du sol (voir annexe B.2). Toutes les résistances sont valables pour le SO_2 et sont calculées pour les autres espèces en appliquant un facteur multiplicatif.

De nombreuses publications ont montré que la déposition sèche de l’ozone était contrôlée par des processus dynamiques durant la nuit alors que durant la journée, la déposition était contrôlée par la résistance stomatale [Lamaud, Carrarra, Brunet, Lopez, and Druilhet, 2005]. Pendant les périodes hivernales, en l’absence de couvert feuillu, la résistance stomatale est faible et les effets dynamiques persistent durant la journée. De nombreuses études ont montré l’influence de la rosée et de l’humidité durant la nuit qui ont tendance à diminuer la résistance stomatale et augmenter la déposition de l’ozone [Zhang, Brook, and Vet, 2002]. De manière générale, les facteurs contrôlant la déposition sèche nocturne sont encore assez mal connus. Dans le passé, les modèles numériques utilisaient une paramétrisation basée sur les travaux de Wesely [1989] qui postulait que la résistance stomatale augmentait lorsque la canopée était humide, à cause de la faible solubilité de l’ozone. Or des observations ont montré que les vitesses de déposition étaient différentes selon la composition chimique de la pluie et de la rosée et selon la résistance aérodynamique. Une diminution ou une augmentation de la vitesse de déposition sèche ont été constatées sur des canopées humides par rapport à des conditions sèches. Metphomod ne prend pas en compte, dans son calcul de déposition sèche, l’humidité de la surface. La description des flux d’ozone nocturnes entre le sol, la canopée et l’atmosphère sera donc à considérer avec attention.

Flux sensible et flux latent entre le sol et la couche de surface

Le flux latent ϕ_{lat} et le flux sensible ϕ_s exprimés en $W\ m^{-2}$, entre le sol et la couche de surface représentée par un point de maille à 10 mètres du sol sont obtenus à partir des sorties de Metphomod w_q et w_θ selon les formules (2.35) et (2.36).

$$\phi_{lat} = L_v w_q \quad (2.35) \quad \phi_s = c_p w_\theta \quad (2.36)$$

Une validation des flux ϕ_{lat} et ϕ_s est proposée dans [Perego, 1999]. La partie 3.2 présente une validation des flux pour le calcul sur la zone ESCOMPTE.

Domaines de calcul pour la région grenobloise

Les domaines utilisés dans le cadre du projet GRENOPHOT étaient un grand domaine couvrant une grande partie de la région Rhône-Alpes et un petit domaine centré sur Grenoble. Ces domaines étaient imbriqués à résolution horizontale de 6 km et 2 km, respectivement. Pour les besoins de la modélisation d’épisodes variés, sous différentes conditions synoptiques, un domaine équivalent au petit domaine utilisé par Couach a été défini : ISERE02KM. Ce domaine est plus étendu au sud pour mieux prendre en compte l’influence du sud du Vercors sur la météorologie locale. Le tableau 2-5 récapitule les domaines utilisés pour la modélisation dans la région grenobloise. Afin de s’adapter au cadastre régional développé par le GIERSA, le système de coordonnées du nouveau domaine ISERE02KM est l’UTM 31.

Tableau 2-5. Domaines Metphomod utilisés pour l'analyse et la prévision

Domaine	Résolution horizontale	Résolution verticale	NX	NY	Système de coordonnées	X du coin SO (km)	Y du coin SO (km)
Grand domaine	6 km	24 niveaux	36	38	Lambert 2 Etendu	753.647	1937.096
Petit domaine	2 km	24 niveaux	34	39	Lambert 2 Etendu	837.647	1986.096
ISERE02KM	2 km	24 niveaux	36	58	UTM 31	684	4937

Influence de la hauteur du toit du modèle

Les simulations réalisées sur le domaine régional à mailles de 6 km de côté ont montré parfois la présence de vents forts au sol qui n'étaient pas confirmés par les mesures aux stations. Le pas de temps de calcul de la dynamique, fixé à $dt = 60$ secondes, dans la configuration de base s'est révélé, même dans certains cas de vents forts, être adapté. Des instabilités numériques (ondes) peuvent apparaître pour les variables vent, température et humidité mais elles sont plus liées à la formation d'ondes gravitaires qui se reflètent sur le toit du modèle (figure 2-9) et qui sont amplifiés par les équations de la physique. Une couche d'amortissement (*damping layer*) est utile dans les situations météorologiques où le vent est fort et occasionne la formation d'ondes de gravité sur le relief.

Données d'altitude et d'occupation du sol

Les 24 classes USGS sont utilisées dans Metphomod avec différents paramètres de sol. Ces paramètres varient en fonction du domaine et de la saison et sont fournis pour le domaine ISERE02KM dans l'annexe B.2. L'occupation du sol et la topographie sont obtenues à partir de données libres. La topographie est extraite de la base de données GLOBE de USGS/NGCD et l'occupation du sol de la base de l'Université du Maryland, USA [Hansen, De Fries, Townshend, and Sohlberg, 1998]. Ces deux bases de données ont une précision de 1 km².

Profil d'ozone au-dessus du toit du modèle

La configuration de MetPhoMod avec un toit du modèle à 8000 mètres a posé le problème du profil d'ozone au-dessus du toit de CHIMERE qui est à l'altitude de 5000 m. Des données sur la colonne totale d'ozone sont disponibles sur le web. Afin d'apporter une meilleure description verticale des concentrations au-dessus du toit de CHIMERE, les radiosondages de Payerne ont été utilisés lorsque ceux-ci étaient disponibles. Ces données sont disponibles librement sur le site du World Ozone and Ultraviolet Data Centre (<http://www.woudc.org>).

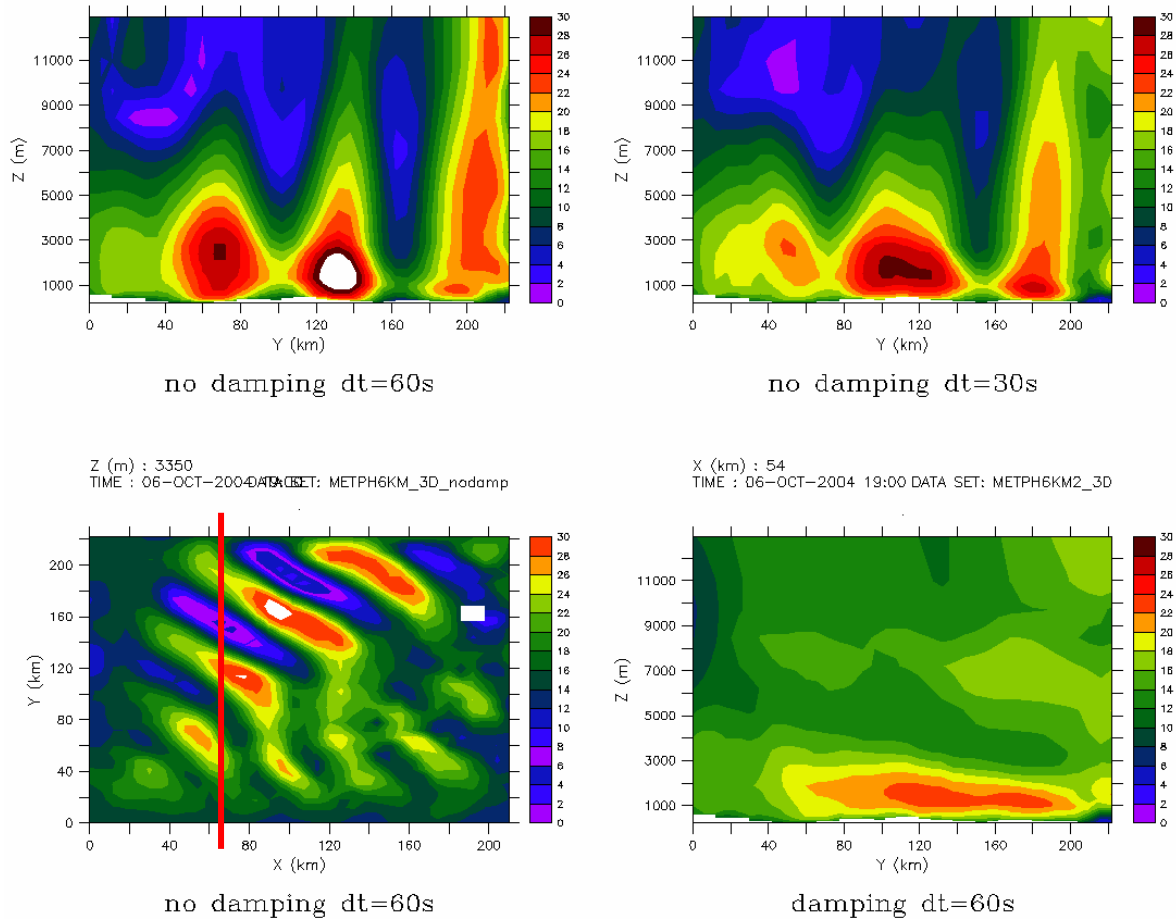


Figure 2-9. Impact de la réduction du pas de temps et de l'utilisation d'une couche d'amortissement au toit du modèle pour la vitesse du vent de la prévision du 4 octobre 2004.

La formation d'onde de gravité de grandes amplitudes a été observée dans la vallée du Rhône à l'altitude 3350 m (en bas à gauche) et en coupe verticale selon le plan rouge (en haut). L'utilisation d'une couche d'amortissement fournit des champs de vent réalistes (en bas à droite), en particulier l'accélération du vent dans la vallée du Rhône ce jour là.

2.4. Interfaçage des différents modèles

L'utilisation de différents modèles ayant des variables différentes en sortie et en entrée nécessite le développement d'interfaces adaptées. Les maillages selon l'horizontale et la verticale des différents modèles sont définis dans des systèmes de coordonnées différents et le passage d'un système à un autre nécessite l'utilisation d'un convertisseur entre systèmes de coordonnées et d'interpolations. La qualité des interpolations garantit le bon fonctionnement des modèles utilisant en entrées les sorties d'un autre modèle. Nous présentons dans la suite les interfaces qui ont été développés afin de coupler les modèles MM5, CHIMERE et Metphomod. Ce couplage est un couplage *offline*, ce qui signifie qu'un modèle de la chaîne de modélisation n'a pas de rétroaction sur un modèle en amont dans la chaîne. Le calcul des variables météorologiques issues de MM5 dans le modèle CHIMERE est largement décrit sur le site du modèle CHIMERE : <http://euler.polytechnique.fr/chimere>.

Forçage de Metphomod avec MM5 et CHIMERE

Metphomod est un code atmosphérique à part entière qui inclut un mécanisme chimique. C'est un code régional qui nécessite l'emploi de conditions de bords pour la météo et la chimie. Ces conditions sont obtenues grâce à un modèle à grande échelle (MM5, ALADIN, ISM, CHIMERE) ou à partir de radiosondages. Metphomod utilise plusieurs types de fichiers pour définir les conditions de bords. La condition de bords utilisée dans MetPhoMod pour nos calculs est semblable à la condition *sponge* de MM5 avec des coefficients différents pour le vent et pour les scalaires. Pour le vent aux centres de mailles, les coefficients $w(n)$ valent 0.9984, 0.992, 0.96 et 0.8 pour $n = 1, 2, 3, 4$, respectivement. Pour les scalaires aux centres de mailles, les coefficients $w(n)$ valent 0.995, 0.98, 0.96 et 0.94 pour $n = 1, 2, 3, 4$, respectivement. Ces coefficients ont été déterminés par [Perego, 1999]. Cette condition de bord permet d'amortir les valeurs en frontière de domaine. Plus ces coefficients sont proches de 1, plus les structures fines calculées par MM5 et CHIMERE aux frontières du domaine de MetPhoMod sont conservées intactes. En retour, des coefficients trop élevés conduisent à des instabilités aux frontières du domaine Metphomod. Des coefficients trop faibles conduisent à une perte d'information aux bords de Metphomod. Le calcul dynamique de Metphomod utilise à ses quatre frontières latérales des valeurs des composantes horizontales du vent u et v , de la température potentielle virtuelle θ_{virt} et de l'humidité spécifique q qui varient en temps et en espace. En toit de modèle, on doit spécifier une pression, une tendance de pression variant en temps et en espace et une condition de température. Toutes ces variables sont calculées à partir du calcul MM5 sur un des domaines présentés plus haut.

*Méthode d'interpolation des coordonnées géographiques : module **PROJECTION***

La chaîne PREVALP utilise des modèles et des données provenant de différents organismes. A l'échelle planétaire, les différents organismes ne travaillent pas avec les mêmes coordonnées géographiques et l'utilisation des données dans un cadre commun nécessite de réaliser le passage entre les différentes projections géographiques. La chaîne PREVALP utilise des données utilisant trois grands systèmes de coordonnées : les coordonnées géographiques en longitude et latitude définie sur une géoïde (ED 50, WGS 84 ou NTF), la projection Lambert Conique Conforme et pour la France le Lambert 2 Etendu, et la projection *Universal Transverse Mercator* (UTM). La conversion des coordonnées entre les différentes projections nécessite l'utilisation de Systèmes d'Information Géographiques (SIG). Ces outils sont coûteux et assez lourds à l'emploi puisqu'il faut transformer manuellement les coordonnées. Afin de réaliser automatiquement des conversions entre les différentes projections, le module PROJECTION a été développé. PROJECTION est un ensemble de routines codées en FORTRAN créées à partir de routines existantes et disponibles librement. Le module projection est décrit dans l'Annexe B.1.

*Méthode d'interpolation à partir de MM5 : module **TOMETPH***

Les différentes étapes pour générer les fichiers de bords pour la météo sont :

1. la conversion de coordonnées géographiques en latitude et longitude vers le Lambert conique conforme (Lambert 2 étendu) ou l'UTM par le module PROJECTION décrit dans l'annexe B.1 ;
2. l'interpolation verticale des variables météo (interpolation linéaire) de MM5 sur les niveaux verticaux de MM5 ;
3. l'interpolation horizontale des variables météo (interpolation linéaire) de MM5 sur la grille de Metphomod ;
4. pour les points de grille de Metphomod situés sous le sol de MM5 on procède comme suit :
 - a. pour la température potentielle θ_v , on applique un gradient nul (stratification neutre) à partir du niveau 1 de MM5 jusqu'au niveau de référence de Metphomod ;
 - b. pour le rapport de mélange en vapeur d'eau q , on assigne à toutes les mailles de Metphomod situées sous le sol de MM5 la valeur du premier niveau de MM5 ;
 - c. les composantes u et v du vent horizontal sont interpolées suivant un profil de vent correspondant à une stratification neutre en dessous du 2^{ème} niveau de MM5. Cette méthode d'interpolation permet de diminuer l'influence du forçage de MM5 dans les vallées tout en conservant la direction du vent. Des vents trop forts sont observés si on utilise une interpolation linéaire en dessous du sol de MM5.

Pour le fichier de forçage en toit de Metphomod, deux options sont disponibles et présentées dans [Perego, 1999] :

1. l'option *Coriolis = full* : on calcule la pression à l'altitude de la maille Metphomod par interpolation linéaire sur une colonne de MM5. Ensuite on procède à un lissage linéaire par 9 points de maille Metphomod. La valeur de TopPressure est prise comme la moyenne au premier pas de temps de la simulation des pressions au toit de Metphomod. TopTemp est calculée de la même manière par interpolation verticale de MM5 puis lissage horizontal ;
2. l'option *Coriolis = geostrophic* : le calcul de TopPressure est semblable à l'option *Coriolis = full* mais deltaTopPressure est fixée à 0 au toit du domaine. On calcule les composantes u_{geos} et v_{geos} du vent géostrophique à chaque niveau de Metphomod. TopTemp est calculée de la même manière par interpolation verticale de MM5 puis lissage horizontal.

Interpolation des concentrations chimiques CHIMERE2RACM

De la même manière que pour les variables météo, les concentrations en espèces du mécanisme chimique ont besoin d'être définies aux bords. Les concentrations sont exprimées en ppbV. En sortie de CHIMERE, on utilise 20 espèces. Ces 20 espèces du mécanisme MELCHIOR 2 ont été choisies car on pouvait facilement réaliser la liaison entre elles et des espèces du mécanisme RACM. En effet, les mécanismes chimiques ont de nombreuses espèces en commun. On identifie les correspondances entre mécanismes en observant la masse molaire et la réactivité avec les radicaux HO• dans les deux mécanismes chimiques. La correspondance entre les espèces MELCHIOR 2 et les espèces RACM équivalente en regard de leur réactivité et de leur masse molaire est donnée dans le tableau 2-6. En ne perdant pas de vue que le forçage chimique que nous utilisons sert à replacer la simulation à Grenoble dans le contexte régional, les polluants qui doivent obligatoirement figurer dans la liste d'espèces sont ceux qui jouent un rôle dans la pollution transportée à distance. Ces espèces sont l'ozone et ses composés associés, comme HNO₃, les aldéhydes, les cétones ou le PAN. On fournit également des concentrations en espèces qui participent à la photochimie comme NO₂ ou différents composés organiques volatils (COV) : terpènes, isoprène, certains alcanes et alcènes.

Tableau 2-6. Liste des espèces chimiques du mécanisme MELCHIOR 2 équivalentes aux espèces RACM

Nom MELCHIOR	Description MELCHIOR	Nom RACM	Description RACM
O3	ozone	O ₃	ozone
NO2	nitrogen dioxide	NO ₂	nitrogen dioxide
NO	nitric oxide	NO	nitric oxide
PAN	peroxyacetyl nitrate	PAN	peroxyacetyl nitrate and higher saturated PANs
HNO3	nitric acid	HNO ₃	nitric acid
SO2	sulfur dioxide	SO2	sulfur dioxide
CO	carbon monoxide	CO	carbon monoxide
CH4	methane	CH4	methane
C2H6	ethane	ETH	ethane
NC4H10	n-butane	HC5	alkanes, alcohols, esters and alkynes with HO rate between $3.4 \cdot 10^{-12}$ and $6.8 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
C2H4	ethene	ETE	ethene
C3H6	propene	OLT	terminal alkenes
OXYL	o-xylene	TOL	toluene and less reactive aromatics
C5H8	isoprene	ISO	isoprene
APINEN	α-pinene	API	α-pinene and other cyclic terpenes with one double bonds
HCHO	formaldehyde	HCHO	formaldehyde
CH3CHO	acetaldehyde	ALD	acetaldehyde and higher aldehydes
GLYOX	glyoxal	GLY	glyoxal
MGLYOX	methyl glyoxal	MGLY	methylglyoxal and other α-carbonyl aldehydes
CH3COE	methyl ethyl ketone	KET	ketones

Les mécanismes chimiques MELCHIOR 2 et RACM sont différents et le couplage de différents mécanismes chimiques peut se révéler délicat. L'approche qui a été utilisée permet de respecter la réactivité des différents COVNM. Les radicaux participant à la photochimie ont des concentrations nulles aux bords de Metphomod. On fait l'hypothèse que les radicaux produits à l'extérieur de notre domaine local ne participent pas à la photochimie à l'intérieur du domaine. Cette hypothèse est justifiée par la faible durée de vie des radicaux qui est très inférieure au temps caractéristique de résidence des espèces à l'intérieur du domaine de calcul. Etant donné les dimensions du domaine Metphomod (72 km sur 108 km) cette hypothèse est justifiée pour des valeurs de la vitesse du vent de l'ordre de 10 m s^{-1} . Le temps de résidence d'une espèce dans le domaine est alors de une à deux heures. On admet ici que tous les radicaux qui participent à la photochimie et notamment les radicaux $\text{RO}\bullet$, $\text{RO}_2\bullet$ et $\text{HO}\bullet$ sont produits dans le domaine à partir des NO_x et des COV apportés aux frontières du domaine ou émis au sol.

Les autres espèces de RACM qui peuvent participer à la photochimie ont des concentrations aux bords du modèle données dans le tableau 2-7. Pour les espèces HC3, HC8 et OLI, on fixe la concentration aux bords de Metphomod à 0. Les alcanes entrent aux bords de Metphomod sous la forme de HC5 et les aromatiques sous la forme de TOL.

Tableau 2-7. Concentrations par défaut des espèces RACM tirées de [Couch, 2002]

Espèces RACM	Concentrations initiales et aux bords (ppbV)
MO2	$1.16 \cdot 10^{-6}$
ACO3	$2.25 \cdot 10^{-9}$
ONIT	$5.52 \cdot 10^{-7}$
HONO	$3.85 \cdot 10^{-6}$
HC3	0
HNO4	$1.89 \cdot 10^{-6}$
HC8	0
N2O5	$3.75 \cdot 10^{-6}$
NO3	$1.91 \cdot 10^{-7}$
HO2	$2.19 \cdot 10^{-7}$
OLI	0
XYL	$1.5 \cdot 10^{-3}$
DCB	$2.20 \cdot 10^{-6}$
CSL	$1.91 \cdot 10^{-7}$
H2O2	$2.47 \cdot 10^{-7}$

Verticalement les valeurs calculées par CHIMERE sont linéairement interpolées sur les niveaux de Metphomod, indépendamment du relief de l'un ou l'autre des modèles. Pour les cellules de Metphomod situées sous le sol de CHIMERE, on utilise la valeur du premier niveau de CHIMERE.

Interpolation des concentrations chimiques d'un modèle chimique très grande échelle MOZAIC2RACM

Afin d'étudier le mélange et le transport d'ozone stratosphérique dans les Alpes, une interface a été développée pour utiliser des données chimiques d'un modèle climatique tel MOZART [Horowitz, Walters, Mauzerall, Emmons, Rasch, Granier, Tie, Lamarque, Schultz, Tyndall, Orlando, and Brasseur, 2003] ou les concentrations d'un traceur calculées par le modèle lagrangien FLEXPART [Stohl, Forster, Frank, Seibert, and Wotawa, 2005]. Le calcul des concentrations aux bords de Metphomod est réalisé de manière identique au calcul du module CHIIMERE2RACM. Une application de ce module est donnée au chapitre 7 lors d'un épisode d'intrusion d'ozone stratosphérique. Les modèles très grande échelle utilisent des schémas de mélange dans la CLA qui ne prennent pas bien en compte le relief. Dans la région alpine, des résolutions de l'ordre de 100 km ne permettent pas de représenter le relief alpin de manière satisfaisante. Afin de limiter l'impact des bords fournis par ces modèles dans la CLA du modèle Metphomod, on utilise les sorties des modèles climatiques uniquement à une altitude supérieure à 3000 m. Cette altitude est représentative de l'altitude à laquelle se développe la CLA lors d'une journée estivale

2.5. Préparation des émissions anthropiques pour CHIMERE et Metphomod

Le calcul des émissions d'un modèle de chimie transport traitant la chimie de l'ozone est l'une des tâches les plus délicates de la modélisation. Le calcul des concentrations d'ozone dans l'atmosphère nécessite de disposer des émissions définies avec la plus grande précision temporelle possible. La plupart du temps, les cadastres d'émission ne fournissent pas une information aussi précise. Excepté certains cadastres développés pour les besoins de la modélisation comme celui d'ESCOMPTE [François, Grondin, Fayet, and Ponche, 2005], les cadastres se limitent à fournir une masse totale émise sur une zone géographique durant une année. Pour faciliter le calcul d'un cadastre, une année de référence est choisie et tous les calculs des émissions sont réalisés à l'aide de données valables pour cette année de référence. Bien souvent, les cadastres d'émission sont définis sur des grilles. Dans la suite, nous décrivons comment sont calculées les émissions nécessaires au calcul chimique à partir de cadastres d'émission pour différentes espèces gazeuses. Ces cadastres sont des cadastres annuels et disponibles avec une résolution spatiale qui dépend de la grille sur laquelle est définie le cadastre (tableau 2-8). Les émissions sont exprimées en t/km^2 . Le calcul des émissions horaires pour une période de simulation donnée est réalisé à partir d'un cadastre annuel en masse décrit sur une grille à résolution variable. Pour nos calculs, nous utilisons trois cadastres différents : un cadastre du CITEPA réalisé en 1999 pour les besoins de la

modélisation dans le cadre de GRENOPHOT [Bouscaren, Rivière, and Heymann, 1999], un cadastre régional réalisé en interne par le GIERSA [Quiniou and Chanut, 2005] et le cadastre EMEP [Vestreng, Breivik, Adams, Wagener, Goodwin, Rozovskaya, and Pacyma, 2005]. Le tableau 2-8 récapitule les caractéristiques des différents cadastres.

Tableau 2-8. Caractéristiques de différents cadastres utilisés pour la modélisation

Cadastre	Année de référence	Domaine Précision de grille	Système géographique	Espèces	Résolution temporelle
CITEPA	1997	Région Rhône-Alpes 6 km par 6 km	Lambert 2 Etendu	CH ₄ , SO ₂ , NO _x , COVNM	horaire
CITEPA	1997	Région grenobloise 1 km par 1 km	Lambert 2 Etendu	CH ₄ , SO ₂ , NO _x , COVNM	horaire
GIERSA	2003	Région Rhône-Alpes 1 km par 1 km	UTM 31	NO _x , COVNM	annuel
EMEP	2002	Europe 50 km par 50 km	coordonnées EMEP	NO _x , COVNM, CO, SO _x , PS	annuel

2.5.1. Calcul d'un cadastre annuel à partir de l'inventaire EMEP (prepCadastre)

Afin de disposer d'émissions annuelles sur un domaine couvrant la France, le cadastre EMEP (<http://www.emep.int>) à mailles de 50 km est utilisé. Le module prepCADASTRE redistribue les émissions annuelles de la grille EMEP sur une grille plus fine (18 km) correspondant à la grille CHIMERE (FRA18KM) utilisée pour le calcul chimique. Cette redistribution s'effectue en prenant en compte la classe SNAP, l'occupation du sol et l'altitude. Cette redistribution, utilisant la topographie, permet en région montagneuse de ne pas affecter les émissions au-dessus d'une certaine altitude. L'occupation du sol permet d'éviter d'affecter des émissions présentes sur des continents à la résolution du cadastre EMEP et qui correspondent à des étendues d'eau visibles à la résolution de 18 km de CHIMERE. Il est également possible d'apporter des pondérations pour certaines occupations du sol. Par exemple, une pondération a été utilisée pour les zones urbaines afin de concentrer les émissions d'une maille EMEP dans les centres urbains contenus dans cette maille. Le cadastre EMEP classe les sources anthropiques selon les 10 classes SNAP de niveau 1. Ces classes sont définies dans l'annexe A.3. La répartition des émissions EMEP selon l'occupation du sol s'est faite de manière arbitraire puisque ce travail grande échelle sortait du cadre de ce travail de thèse et nécessitait de nombreuses études statistiques. On retiendra néanmoins que, pour une résolution de CHIMERE de 6 km, la redistribution des émissions EMEP sur la grille CHIMERE réalisée

par prepCADASTRE permet d'obtenir des émissions assez réalistes, en fond de vallée, comparées aux cadastres à fine résolution comme celui du GIERSA ou celui développé pour les besoins de la modélisation dans le cadre du programme POVA [Brulfert, Chollet, Jouve, and Villard, 2005].

2.5.2. Calcul des émissions horaires pour les mécanismes MELCHIOR et RACM (CADASTRE)

La qualité d'un calcul chimique est fortement dépendante de la localisation spatiale des émissions, de la répartition temporelle des émissions et de la qualité de la description des composés organiques volatils non méthaniques (COVNM). Dans les mécanismes chimiques utilisés, les COV sont regroupés en espèces décrites par le modèle en fonction de leur réactivité avec les radicaux HO• présents dans l'atmosphère. Dans la suite, le calcul des modulations horaires des émissions et le regroupement des COVNM en espèces décrites par les modèles RACM [Stockwell, Kirchner, Kuhn, and Seefeld, 1997] et MELCHIOR 2 [Derognat, 1998] sont détaillés. Le module CADASTRE va lire les données des cadastres disponibles (tableau 2-8) et appliquer les variations temporelles en fonction de la classe SNAP. A l'aide de tables de spéciation des COVNM, il va répartir les émissions annuelles pour une classe SNAP vers un panel de 221 COV réels. Ces COV réels sont ensuite agrégés au sein des espèces des mécanismes chimiques (32 pour RACM et 19 pour MELCHIOR 2).

Calcul des émissions horaires non biogéniques (anthropiques)

Afin de simplifier le calcul des émissions, on classe les journées d'une année selon deux paramètres : le mois et le jour de la semaine (5 jours de semaine, samedi ou dimanche). Pour une année, on obtient donc 84 jours types. Les émissions de ces 84 journées types sont calculées en appliquant des profils de variation des émissions d'un mois à l'autre $a_{mois}(m,s)$ et des profils de variation des émissions d'un jour à l'autre $a_{jour}(j,m,s)$ dépendant du mois de l'année m (m de 1 à 12), du jour de la semaine j (j de 1 à 7) et la classe SNAP s (s de 1 à 10). Le calcul des émissions durant l'heure h (h de 1 à 24) pour le jour j , le mois m et la classe SNAP s , est réalisé grâce à un profil d'émissions au cours de la journée $a_{heure}(h,j,m,s)$. En entrée, le module CADASTRE a donc besoin des coefficients d'émissions mensuels $a_{mois}(m,s)$, journaliers $a_{jour}(j,m,s)$ et horaires $a_{heure}(h,j,m,s)$ pour le jour j (j de 1 à 7), le mois m (m de 1 à 12) et la classe SNAP (s de 1 à 10). Ces coefficients sont donnés pour la SNAP 7 sur la figure 2-10. L'émission horaire d'un espèce A $e_A(r,h,j,m,s)$ dans une maille du modèle pour le mois m , le jour j et l'heure h en fonction de l'émission annuelle $E_A(s)$ selon (2.37) où n_{mois} est le nombre de jours dans le mois m .

$$e_A = \frac{7}{n_{mois}} \times a_{mois}(m,s) \times a_{jour}(j,m,s) \times a_{heure}(h,j,m,s) \times E_A(s) \text{ pour } r = 1 \text{ à } 221 \quad (2.37)$$

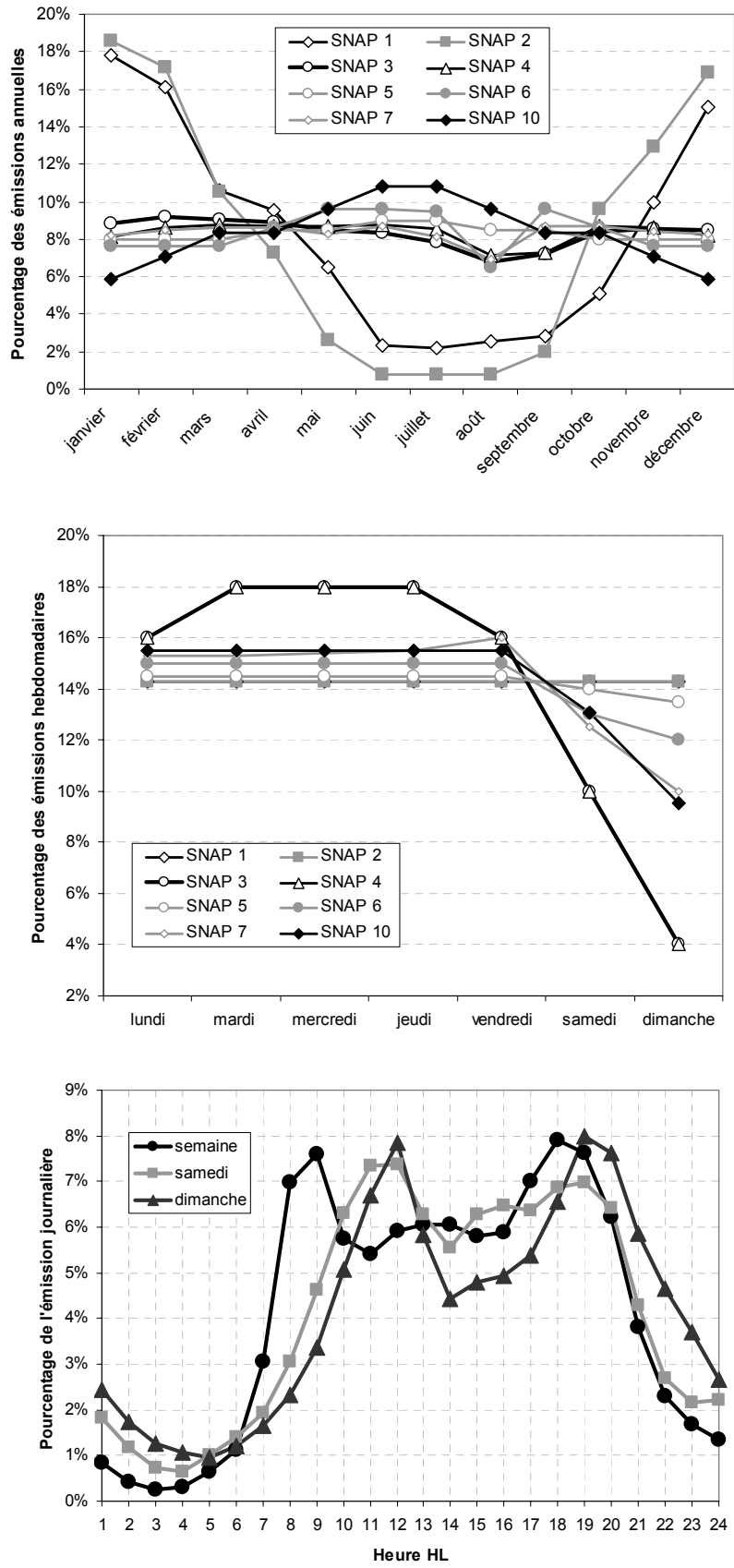


Figure 2-10. Coefficients $a_{mois}(m,s)$, $a_{jour}(j,m,s)$ et $a_{heure}(h,j,m,s)$ pour le mois d'août 2003 ($m = 8$) appliqués aux émissions du trafic ($s = 7$) dans la région grenobloise

La SNAP 11 représente les émissions biogéniques qui sont calculées à partir des sorties météorologiques MM5. Le calcul de ces émissions est détaillé dans la partie 2.6.

Spéciation des composés organiques volatils non méthaniques pour les émissions surfaciques

Les émissions annuelles de composés volatils non méthaniques (COVNM) provenant des différents cadastres sont utilisées en entrée de la chaîne de modélisation sans distinction entre les composés organiques. La spéciation en COVNM réels est réalisée suivant [Passant, 2002]. Cette spéciation comporte 221 composés organiques. La spéciation des émissions totales de COVNM est réalisée en fonction de la classe SNAP de l'émission. Dans le mécanisme chimique, un composé A réagit avec un radical HO• pour produire un radical A• selon la réaction $A + HO\bullet \rightarrow A\bullet$ dont la constante de réaction est k_A . La figure 2-11 montre que la réactivité d'un COV avec les radicaux HO• dépend fortement de sa chaîne carbonée. Les COVNM les plus réactifs dans l'atmosphère sont les COV aromatiques et les alcènes. La spéciation des composés à l'intérieur de ces deux familles est importante pour la chimie de l'ozone car, plus les composés sont réactifs avec les radicaux HO•, plus des radicaux RO• sont produits rapidement et plus la production d'ozone est rapide [Chaxel, 2003].

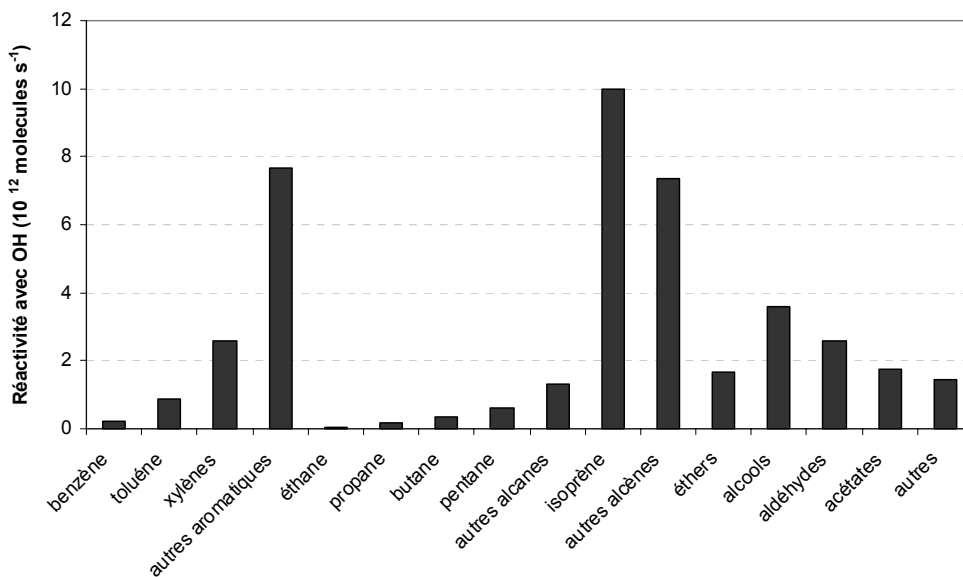


Figure 2-11. Réactivité de COV réels ou réactivité moyenne d'une classe de COV en considérant les 221 COV réels décrits par [Passant, 2002] avec les radicaux HO• dans les conditions standards (température 298 K et pression 1 atm)

La figure 2-12 montre les parts relatives des émissions pour les grandes familles de COVNM : aromatiques, alcanes, alcènes, aldéhydes et alcools. Les classes SNAP 7 et 8 (trafic routier et non routier) sont les plus gros émetteurs de COV aromatiques et d'alcènes et vont donc participer de manière importante à la photochimie de l'ozone. La figure 2-13 montre la répartition en masse des émissions de composés aromatiques. Les répartitions varient

considérablement suivant la classe SNAP prise en compte. Pour la classe SNAP 3 (combustions dans l'industrie), le benzène représente 12 % des émissions totales de COVNM émis par ces sources. Le chauffage (SNAP 2) émet une quantité importante de benzène en comparaison des autres aromatiques. Pour les SNAP 7 et 8, il représente respectivement 4 et 3 % des émissions totales de COVNM. Le chauffage et le trafic routier sont les deux plus gros émetteurs de benzène. Les autres composés aromatiques importants sont le toluène, l'éthylbenzène et les xylènes. Ces composés sont essentiellement émis par le trafic. Les xylènes sont des composés très réactifs avec les radicaux HO• qui vont participer de manière très importante à la production de l'ozone. Le toluène et l'éthylbenzène ont des réactivités moindres mais sont des précurseurs de l'ozone parmi les plus importants. L'étude du rapport des émissions massiques de benzène sur celles du toluène ($C_6H_6/CH_3C_6H_5$) montre que selon la classe SNAP, ce rapport est supérieur ou inférieur à 1. Il sera supérieur à 1 pour la SNAP 2 et 3 et inférieur à 1 pour les SNAP 7 et 8. Ce rapport peut-être utilisé, à proximité des sources, pour caractériser le type d'émetteur si on a accès aux concentrations de benzène et de toluène.

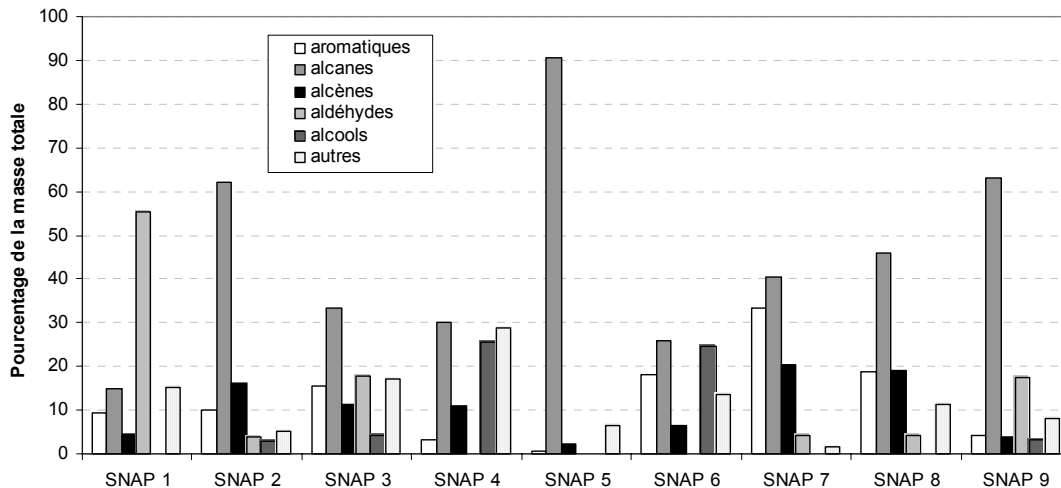


Figure 2-12. Spéciation en différents COV réels de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]

Les alcanes sont des composés émis par toutes les sources de COV, quel que soit la classe SNAP. Ils sont essentiellement émis par la classe SNAP 5 (extraction et distribution de combustibles fossiles). Les stations service distribuant de l'essence sont des émetteurs importants d'alcanes car ce sont des composés qui se vaporisent facilement lors du remplissage des réservoirs des véhicules. Le trafic routier est un émetteur important d'alcanes par l'évaporation du carburant lors des trajets et à l'arrêt. Les alcanes sont moins réactifs que les composés aromatiques et les alcènes mais les émissions sont importantes comparées aux autres composés, particulièrement par fortes températures. De cette manière, ils participent de manière importante à la photochimie. Certains alcanes, tels le cyclohexane, sont cycliques, ce qui les rend plus réactifs avec les radicaux HO•.

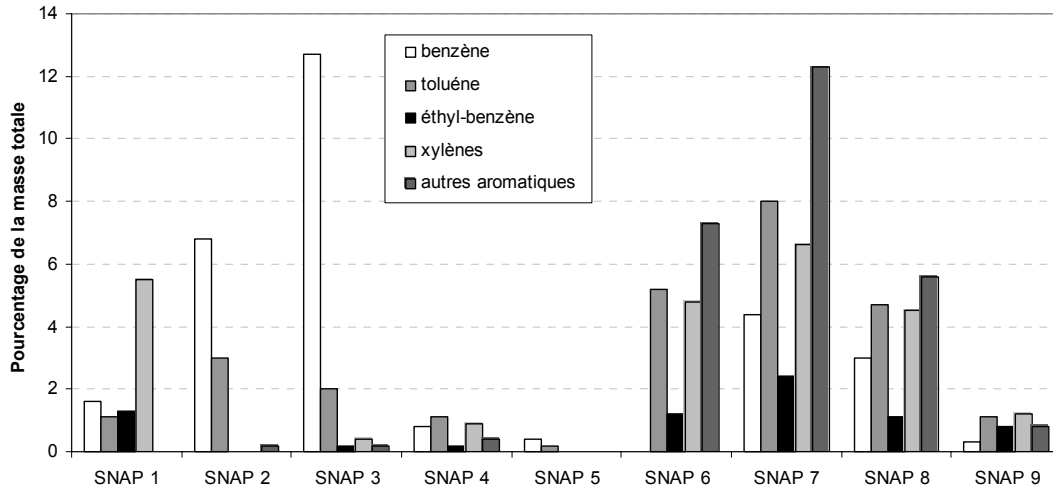


Figure 2-13. Spéciation en composés aromatiques de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]

La figure 2-14 montre la répartition en masse des émissions d'alcènes. La présence de liaisons doubles dans les chaînes carbonées de ces composés les rend plus réactifs avec les radicaux HO•, comparés aux alcanes. L'éthylène est le principal composé émis par les procédés industriels (SNAP 2 et 3) et par le trafic routier (SNAP 7) et non routier (SNAP 8). L'éthylène est peu réactif comparé aux autres alcènes. L'un des composés les plus réactifs est le diméthyl-(1,3)buta-2-diène, aussi appelé isoprène. Il est émis en petite quantité par les sources anthropiques (1 % des émissions totales) par le trafic. Ce composé est émis majoritairement par la végétation, particulièrement par fortes températures (> 30°C) comme le montre la partie 2.6. Vu la réactivité des alcènes (figure 2-11), la qualité de la spéciation de cette classe de composés est déterminante pour bien décrire la production d'ozone dans un calcul chimique.

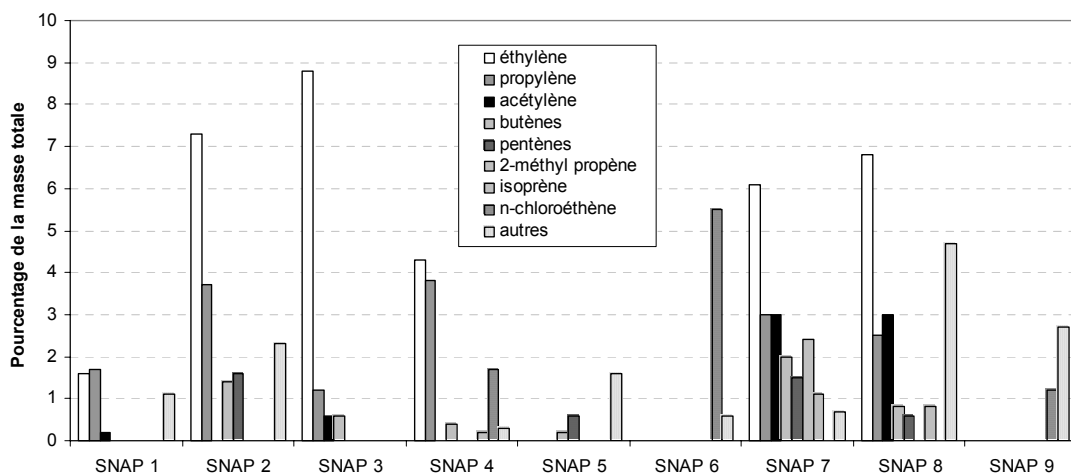


Figure 2-14. Spéciation en alcènes de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]

Agrégation des COV réels en espèces RACM et MELCHIOR 2

Chaque COVNM réel ne réagit pas forcément avec les radicaux HO• de manière unique. La présence de différents groupements chimiques sur une espèce réelle va lui permettre de participer à différentes réactions définies dans le mécanisme chimique. Afin de prendre en compte les différentes réactions auxquelles peut participer cette espèce réelle, on va affecter l'émission d'une espèce réelle A à plusieurs espèces du modèle. On définit donc la matrice d'agrégation $A_{\rightarrow M}$ pour l'espèce du modèle M. Cette matrice fixe la part de l'émission de l'espèce réelle A (la r -ième parmi les n espèces réelles) dans l'émission de l'espèce du modèle M. Par exemple, si A ne réagit pas de manière similaire à l'espèce M, $A_{\rightarrow M}(r) = 0$. Si 30 % de l'émission de A participe aux réactions de l'espèce M, $A_{\rightarrow M}(r) = 0,3$. L'agrégation des espèces réelles dans les espèces modèle doit être réalisée en respectant la réactivité avec les radicaux HO• [Middleton, Stockwell, and Carter W., 1990]. On définit alors le facteur multiplicatif $fac_{\rightarrow M}(r)$ par (2.38).

$$fac_{\rightarrow M}(r) = \left(\frac{N_a}{3600 \times 10^{10} \times M(r)} \right) \times b_{\rightarrow M}(r) \quad \text{avec} \quad b_{\rightarrow M}(r) = \left(\frac{1 - e^{-INTOH \times R(r)}}{1 - e^{-INTOH \times R_M}} \right) \quad (2.38)$$

$fac_{\rightarrow M}(r)$ est le facteur multiplicatif qui prend en compte la différence de réactivité entre l'espèce réelle A (la r -ième parmi les n espèces réelles) et l'espèce du modèle M. Le fait que A soit plus réactive que M ($R(r) > R_A$) sera traduit par un plus grand apport d'espèce A ($b_{\rightarrow M}(r) > 1$). N_a est le nombre d'Avogadro, $M(r)$ la masse molaire de l'espèce réelle A, $R(r)$ la réactivité de l'espèce réelle A et R_M la réactivité de l'espèce modèle M. $INTOH$ est un coefficient qui dépend du mécanisme chimique employé [Middleton, Stockwell, and Carter W., 1990]. Pour nos calculs avec RACM, ce coefficient est pris égal à 3,4 [Stockwell, Kirchner, Kuhn, and Seefeld, 1997]. Pour nos calculs avec MELCHIOR, ce coefficient est pris égal à 1. L'émission e_M de l'espèce M dans les mécanismes MELCHIOR ou RACM (en molécules $s^{-1} cm^{-2}$) est alors donnée par (2.39).

$$e_M(h, j, m, s) = \sum_{r=1}^n A_{\rightarrow M}(r) \times fac_{\rightarrow M}(r) \times e_{COVNM}(h, j, m, s) \quad n = 221 \quad (2.39)$$

Pour les espèces NO, NO2 et N2O, on utilise la décomposition suivante des émissions de NO_x totaux : NO correspond à 90 % de l'émission massique de NO_x, N₂O correspond à 0,8 % de l'émission massique de NO_x et NO₂ correspond à 9,2 % de l'émission massique de NO_x. Pour SO₂, CH₄ et CO, on applique directement les coefficients horaires.

Discussion sur la réactivité des différents COVNM

Afin de connaître la participation d'un COVNM dans la production d'ozone, Carter [1994] a proposé un indice MIR (*Maximum Incremental Reactivity*). Cet indice est calculé avec un

modèle de boîte utilisant un mécanisme chimique et consiste, pour un COVNM donné, à obtenir le maximum de réactivité après 10 h de réaction en ajustant la concentration de NO_x. L'indice MIR est caractéristique des panaches urbains où le régime de production d'ozone est limité par les COV, lorsque le rapport des concentrations de COV sur NO_x est faible, comme c'est le cas dans les zones peuplées avec de larges émissions de NO_x.

Tableau 2-9. Indices de réactivité de différents COV obtenus avec un modèle de boîte utilisant le mécanisme SAPRC-99 d'après [Hakami, Harley, Milford, Odman, and Russell, 2004] et [Carter, 1994]

Name	Code	MIR	MOIR	MIR _{8h}	MOIR _{8h}
2-Methyl 2-butene	2MBT	14.45	4.65	9.61	7.04
1,3-Butadiene	BUTD	13.58	4.83	7.90	5.52
Propene	PRPE	11.58	4.43	6.50	4.57
Isoprene	ISOP	10.69	3.95	6.25	4.21
<i>m</i> -Xylene	XYLM	10.61	3.19	6.24	4.17
Ethylene	ETHE	9.08	3.70	4.77	3.56
Formaldehyde	HCHO	8.97	2.56	5.91	4.06
Higher aldehydes	RCHO	7.88	2.97	4.52	2.87
Higher lumped olefines	OLE1	7.80	3.11	4.28	2.91
1,2,4 Trimethyl benzene	124B	7.18	2.32	4.11	2.71
Acetaldehyde	CCHO	6.84	2.56	3.89	2.52
<i>a</i> -Pinene	APIN	4.29	1.56	2.58	1.78
<i>p</i> -Xylene	XYLP	4.25	1.36	2.20	1.45
Toluene	TOLU	3.97	1.17	2.00	1.31
Methylcyclopentane	MCPT	2.42	1.33	1.14	0.87
Ethanol	ETOH	1.69	0.93	0.77	0.61
iso-Pentane	IPNT	1.67	1.02	0.79	0.67
<i>n</i> -Pentane	N ₅ C	1.54	0.96	0.71	0.60
Methyl ethyl ketone	MEK	1.48	0.65	0.74	0.50
2,2,4 Trimethyl pentane	224P	1.44	0.81	0.69	0.57
<i>n</i> -Butane	N ₄ C	1.33	0.83	0.61	0.52
Acetylene	C ₂ H ₂	1.25	0.49	0.59	0.43
<i>n</i> -Butyl acetate	BACT	0.89	0.54	0.41	0.33
Benzene	C ₆ H ₆	0.82	0.34	0.37	0.27
Methyl t-butyl ether	MTBE	0.78	0.47	0.38	0.34
Methanol	MEOH	0.71	0.34	0.34	0.27
Isopropyl alcohol	IPOH	0.71	0.39	0.37	0.32
Acetone	ACET	0.43	0.17	0.22	0.14
Ethane	C ₂ H ₆	0.31	0.20	0.14	0.12
Carbon monoxide	CO	0.06	0.04	0.03	0.03
Methane	CH ₄	0.01	0.01	0.01	0.01
Benzaldehyde	BALD	-0.61	-1.64	-0.55	-1.09

L'indice MOIR (*Maximum Ozone Incremental Reactivity*) est calculé avec un modèle de boîte et consiste, pour un COVNM donné, à obtenir le maximum d'ozone pour un mélange de ce composé avec d'autres COVNM après 10 h de réaction en ajustant la concentration de NO_x. Les indices MIR_{8h} et MOIR_{8h} sont adaptés des indices MIR et MOIR pour des périodes de réaction de 8 h. Le tableau 2-9 montre les indices MIR et MOIR pour différents COVNM. D'après cette étude, les COVNM qui forment le plus d'ozone en milieu urbain et périurbain sont le 2-méthyl-2-butène, le 1,3-butadiène, le propène, l'isoprène, le *m*-xylène et l'éthylène. Viennent ensuite les aldéhydes. On remarque que cette classification est différente de la classification en fonction de la réactivité avec les radicaux HO• de la figure 2-11. Les COVNM avec les indices MIR et MOIR les plus élevés devront être pris en compte de manière rigoureuse dans les cadastres d'émission, dans la spéciation des COVNM à l'émission et dans l'agrégation vers les espèces du mécanisme chimique.

Spéciation des composés organiques volatils non méthaniques pour les grandes sources ponctuelles (GSP)

Il n'existe pas, à l'heure actuelle, de mesures précises de la spéciation des COVNM à l'émission des grandes sources ponctuelles (GSP). Les seules données relatives aux GSP sont

les émissions annuelles de COVNM totaux et des NO_x. En l'absence de spéciation réelle pour ces sources, la modélisation utilise la spéciation pour les émissions surfaciques décrite plus haut. Chaque GSP se voit attribuer une classe SNAP selon son activité et les procédés utilisés. Cette description des GSP introduit de grosses erreurs dans le calcul photochimique car selon les procédés utilisés par une industrie, les COVNM émis sont très différents et ont des réactivités avec les radicaux HO• très variables. Une prise en compte correcte des GSP dans le calcul photochimique nécessite la connaissance de la spéciation des COVNM émis par ces sources. Cette hypothèse sur la spéciation des GSP se rajoute à l'hypothèse des profils temporels décrits plus haut.

2.6. Calcul des émissions biogéniques de CHIMERE et Metphomod

L'interface météo de CHIMERE avec MM5 inclut un modèle de calcul des émissions émises par la végétation et les sols [Derognat, Beekmann, Baueumle, Martin, and Schmidt, 2003]. Les espèces émises par la végétation qui participent à la photochimie sont essentiellement des terpènes, l'isoprène et le NO. Les émissions de terpènes et d'isoprène représentent plus de 90 % des émissions biogéniques en France [Simpson, Guenther, Hewitt, and Steinbrecher, 1995]. Ces émissions dépendent de nombreux facteurs mais les principaux sont la répartition des essences dans les forêts, la période de l'année (pour les feuillus seulement), l'ensoleillement, l'humidité et la température de la canopée. Le mécanisme MELCHIOR 2 regroupe les émissions de COV biogéniques (COVB) dans deux classes : C5H8 (isoprène) et APINEN (α -pinène et autres terpènes). Le mécanisme RACM possède trois classes avec des réactivités différentes : ISO (isoprène), API (α -pinènes et autres terpènes à une liaison double) et LIM (limonène et autres terpènes à deux liaisons doubles). Pour nos calculs avec RACM, nous n'utilisons pas l'espèce LIM et seules les espèces NO, ISO et API sont émises par la végétation. Un module de calcul des émissions biogéniques pour Metphomod a été développé en se basant sur le calcul des émissions biogéniques de CHIMERE. Ce calcul est basé sur le modèle de Guenther et al. [1995]. Dans ce modèle, les émissions de COVB, pour un type de végétation et une période de l'année donnée, dépendent uniquement de la température du feuillage et du flux de *Photosynthetically Active Radiation* (PAR). Les coefficients du calcul sont tirés de [Simpson and al., 1999]. La température du feuillage est prise égale à la température de l'air dans le premier niveau de MM5 (le même calcul qui alimente les champs dynamiques de Metphomod). Afin de prendre en compte les détails du relief de Metphomod absents dans MM5, la différence de température entre le premier niveau de MM5 et le premier niveau de Metphomod est calculée avec le gradient adiabatique humide qui est de -0,6 K par 100 m. Ce calcul fournit une bonne approximation de la température de la canopée de Metphomod. Le second facteur qui contrôle les émissions de COVB dans le modèle de Guenther et al. [1995] est la PAR. La PAR est calculée grâce à l'angle zénithal calculé par CHIMERE. La relation qui lie l'angle zénithal au flux de PAR est la relation (2.40).

$$PAR = \frac{r_1 + r_2}{c} \quad (2.40)$$

$$\text{avec } r_1 = r_0 \alpha \exp(-a\alpha) \text{ et } r_2 = b\alpha(r_0 - r_1)$$

où α est l'angle zénithal et les constantes sont égales à $r_0 = 6,89634$, $a = -0,16$, $b = 0,4$ et $c = 0,0027$. Le flux de PAR calculé en fonction de l'angle zénithal à l'aide de ce modèle est représenté sur la figure 2-15.

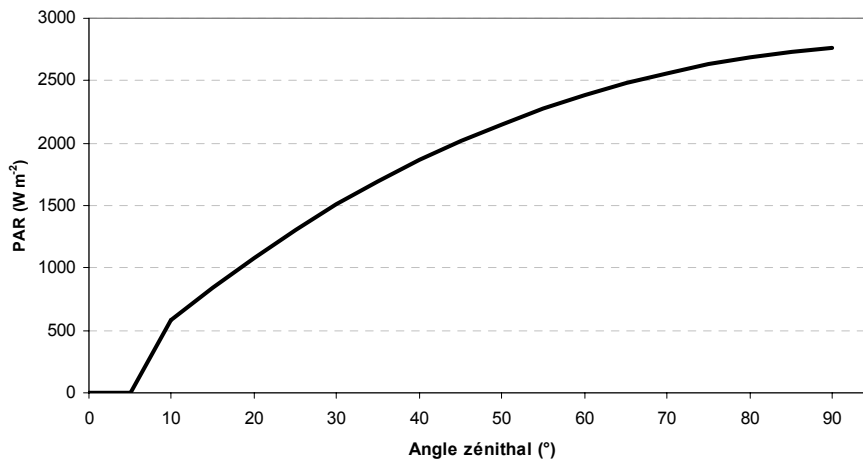


Figure 2-15. Flux de PAR au sommet de la canopée calculé à partir de l'angle zénithal du soleil

Les inventaires d'occupation du sol utilisés pour localiser la végétation sont la base de données de l'Université du Maryland, USA [Hansen, De Fries, Townshend, and Sohlberg, 1998] et la classification CORINE Land Cover pour l'année de référence 2000. Pour des échelles comme celle de la vallée, la classification CORINE Land Cover représente bien mieux l'étagement de la végétation sur les versants. En effet, les feuillus sont présents sur les pentes à basse altitude alors que les forêts d'altitude sont essentiellement peuplées de résineux comme le sapin, l'épicéa et le mélèze. A l'échelle de la vallée, cette distinction entre feuillus et résineux est importante car dans le modèle de [Simpson and al., 1999], les résineux émettent essentiellement des terpènes alors que les feuillus émettent essentiellement de l'isoprène. Les émissions biogéniques pour une surface donnée sont calculées à partir des émissions surfaciques de plusieurs espèces. Pour le détail du calcul, on se reportera à [Derognat, Beekmann, Baueumle, Martin, and Schmidt, 2003]. Le résultat du calcul des émissions des espèces NO, ISO et API pour la première semaine d'août 2003 est présenté sur la figure 2-16. La figure montre que selon l'espèce (ISO, API et NO) et le type de végétation (champs, forêts de feuillus, forêts de résineux, ...), les émissions diffèrent. Dans le modèle d'émission utilisé, les arbres à feuilles caduques (feuillus) n'émettent pas d'isoprène la nuit alors que des terpènes sont émis tout au long de la journée par les résineux. Les feuillus n'émettent pas d'isoprène lorsqu'ils perdent leurs feuilles (automne et hiver essentiellement).

La figure 2-17 montre que les émissions biogéniques pour la période de canicule d'août 2003 ont une composition qui change avec l'altitude du terrain (plus de terpènes et moins d'isoprène lorsqu'on s'élève). On observe donc un changement de la composition des émissions biogéniques avec l'altitude. La part d'isoprène dans les émissions de COVB décroît avec l'altitude et est de 95 % entre 0 m et 400 m asl et de 50 % entre 1600 m et 1800 m (en moles de ISO émises par moles de COVB émises). Les rapports massiques sont facilement obtenus puisque la masse molaire de API est $136 \mu\text{g m}^{-3}$ et celle de ISO est $68 \mu\text{g m}^{-3}$. L'évolution de cette part est importante car, dans le mécanisme RACM, l'espèce ISO est plus réactive que l'espèce API. Vu que le rapport des émissions ISO/API diminue avec l'altitude, les COVB seront moins réactifs en altitude qu'en fond de vallée. Le fait de mal représenter l'emplacement des différentes essences d'arbres peut amener à surestimer les émissions d'isoprène et ainsi surestimer la production d'ozone. Les émissions biogéniques sont estimées à 59 % des émissions totales de COVNM dans la région grenobloise (sur la région du domaine de calcul de Metphomod) par les travaux récents sur le cadastre régional [Quiniou and Chanut, 2005]. Les cadastres réalisés dans le cadre du programme POVA pour la vallée de la Maurienne ont estimé les émissions de COVB annuelles à 53 % et 62 % des émissions totales de COVNM selon la méthodologie employée (CORINAIR ou OFEFP) [Brulfert, Chollet, Jouve, and Villard, 2005].

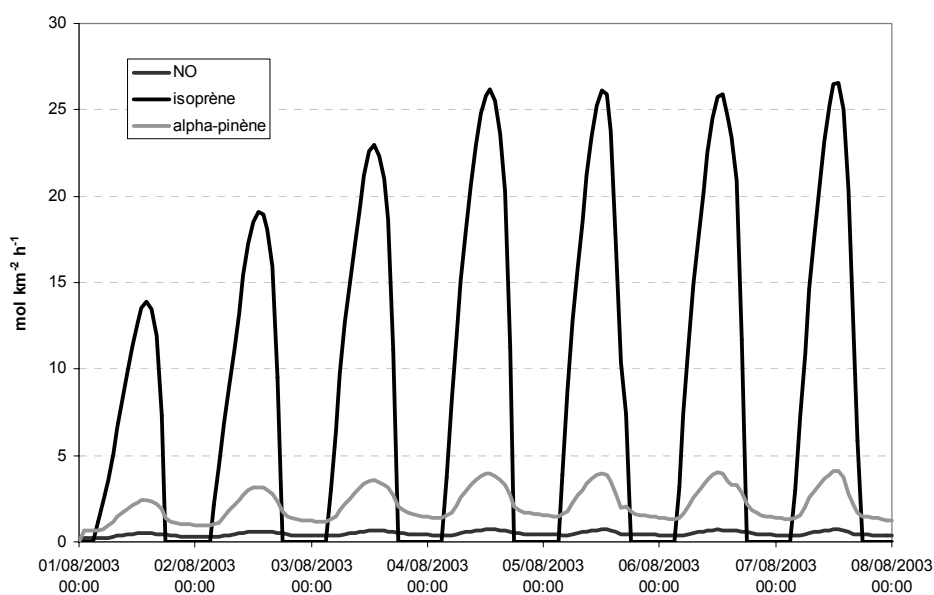


Figure 2-16. Émissions biogéniques horaires moyennées sur toutes les mailles du domaine Metphomod (36 * 54 mailles de 4 km² chacune) du 1^{er} au 8 août 2003

Les incertitudes sur les modèles d'émissions biogéniques sont très importantes. [Simpson, Guenther, Hewitt, and Steinbrecher, 1995] parlent d'incertitudes pouvant atteindre 1000 % pour certaines régions d'Europe et certains épisodes. Nous utilisons le même modèle aux échelles régionales et locales, or ce modèle est un modèle développé pour évaluer les

émissions européennes [Simpson, Guenther, Hewitt, and Steinbrecher, 1995]. Les incertitudes calculées lors de son utilisation pour évaluer les émissions de COV biogéniques en Europe étaient d'un facteur 2 à 3 en moyenne [Simpson and al., 1999]. Ce modèle appliqué à l'échelle régionale a été validé lors de l'expérience ESQUIF à l'aide de mesures sol et aéroportées [Derognat, Beekmann, Baueumle, Martin, and Schmidt, 2003]. L'incertitude qui a été évaluée grâce aux mesures et au modèle CHIMERE correspondait à un facteur 1,5. Des études de sensibilité sur les émissions biogéniques ont été réalisées pour la canicule d'août 2003. Les résultats de ces tests sont présentés dans la partie 6.3.

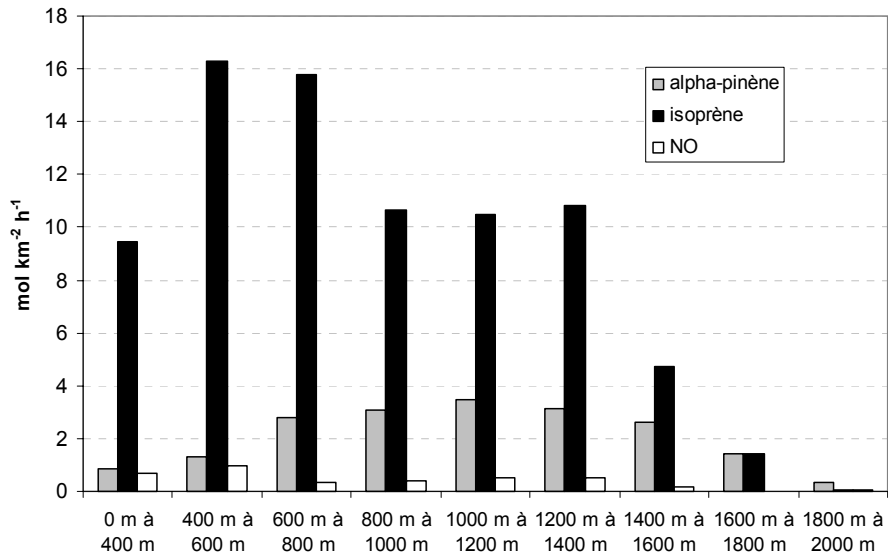


Figure 2-17. Emissions biogéniques moyennes sur le domaine Metphomod (36 * 54 mailles de 4 km² chacune) du 1^{er} au 8 août 2003 en fonction de l'altitude du terrain

2.7. Quels modèles pour quelles échelles ?

Nous venons de montrer que les modèles MM5 et Metphomod possèdent de nombreux points communs tels la formulation non-hydrostatique, la compressibilité mais diffèrent également par leur maillage, leurs coordonnées verticales, la méthode de prise en compte de la radiation solaire sur les pentes ou le calcul du mélange vertical. Les tableaux 2-10 et 2-11 récapitulent les différentes hypothèses et références utilisées dans les modèles MM5, CHIMERE et Metphomod. Le choix d'un modèle pour une application n'est jamais une chose aisée. Les facteurs qui guident ce choix sont la bonne représentation des phénomènes étudiés tout en conservant une simplicité acceptable, des temps de calcul adaptés aux infrastructures informatiques disponibles et les motivations personnelles pour utiliser tel ou tel modèle. La discussion qui suit donne des éléments sur les motivations qui nous ont poussés à choisir tel ou tel modèle pour les échelles étudiées.

Maillages rectangulaire et « terrain-following »

Le maillage cartésien de Metphomod décrit le terrain à l'aide de cubes. Lorsqu'on traite de la région de Grenoble, de nombreuses falaises se trouvent sur les versants des vallées du Y grenoblois [Duhaut and Vigier, 2001]. La description des versants montagneux à l'aide de cubes et de murs verticaux va accentuer certains effets du relief. Cette description du relief s'est révélée particulièrement intéressante en période hivernale lorsque l'atmosphère est très stratifiée sur la verticale, y compris à proximité des versants. Les modèles utilisant une coordonnée verticale de type *terrain-following* vont avoir tendance à diffuser le long des versants, comme ceci a été montré plus haut pour MM5 [Zängl, 2002], avec pour conséquence de ne pas respecter la stratification verticale à proximité des pentes. La prise en compte *terrain-following* par le module de sol de Metphomod permet de conserver les avantages de cette description pour le traitement de la radiation, des flux avec l'atmosphère, des émissions de polluants et de la déposition.

Tableau 2-10. Caractéristiques des solveurs météo utilisés dans la chaîne PREVALP

	MM5	Metphomod
Type de grille horizontale	Arakawa type B	Centre des mailles sauf pour la turbulence et les flux
Résolution horizontale	18 km, 6 km et 2 km	6 km, 2 km et 500 m
Coordonnée verticale	sigma pression	rectangulaire
Nombre de niveaux	27	22, 24 ou 32
Toit de modèle	100 hPa	9000 m asl (\approx 350 hPa)
Pressure formulation	non-hydrostatique	non- hydrostatique
Schéma de fermeture turbulente	mélange non-local [Hong and Pan, 1996]	k- ϵ [Apsley and Castro, 1997]
Microphysique	nuages, pluie, neige	non
Paramétrisation de convection profonde	pour des mailles de côté \geq 6 km	non
Effet d'ombre du relief	[Zängl, 2002] (seul. version 3.7)	non
Technique d'imbrication	<i>two-way</i>	<i>one-way</i>

Microphysique

Metphomod ne possède pas de module de microphysique ce qui réduit son usage à des périodes ensoleillées. Afin de prendre en compte l'impact des nuages sur la radiation solaire et sur le calcul des taux de photolyse, CHIMERE calcule une atténuation à partir de la production de nuages par MM5. Cette valeur d'atténuation peut être fournie à Metphomod afin de corriger la radiation incidente directe en toit de modèle. Cela permet d'utiliser les résultats de la microphysique d'un modèle régional dans un modèle local. Cette approche est justifiée car la formation des nuages est bien souvent mieux décrite à des échelles utilisées

dans notre calcul MM5 (c'est-à-dire à des résolutions horizontales de 6 km et 18 km) qu'à des échelles plus fines (c'est-à-dire à des résolutions horizontales kilométriques). Pour n'avoir pu tester l'effet de cette atténuation, elle ne sera pas utilisée dans le cadre de ce travail de thèse.

Tableau 2-11. Caractéristiques des solveurs chimiques utilisés dans la chaîne PREVALP

	CHIMERE	Metphomod
Couplage avec dynamique	<i>offline</i>	<i>online</i>
Résolution horizontale	18 km, 6 km and 2 km	6 km et 2 km
Coordonnées verticales	hybrid sigma	rectangulaire
Mécanisme chimique	MELCHIOR 2 (44 espèces dont 22 COVNM, 120 réactions) [Derognat, 1998]	RACM (73 espèces dont 32 COVNM, 216 réactions) [Stockwell, Kirchner, Kuhn, and Seefeld, 1997]
Nombre de niveaux	8	24
Toit de modèle	500 hPa	9000 m amsl (\approx 350 hPa)
Algorithme de transport	PPM [Colella and Woodward, 1984]	PPM [Clappier, 1998]
Schéma de diffusion verticale	k-diffusion [Troen and Mahrt, 1986]	k- ϵ [Apsley and Castro, 1997]
Dry deposition scheme	[Wesely, 1989]	[Wesely, 1989]
Microphysique	effect of cloud water on radiation	no cloud effects
Technique d'imbrication	one-way	one-way
Emissions	Au sol seulement	Au sol et en altitude (sources ponctuelles)

Calcul chimique

Les modèles CHIMERE et Metphomod ont été utilisés à une résolution horizontale de 2 km pour un calcul photochimique dans l'agglomération grenobloise du 1^{er} au 15 août 2003. La figure 2-18 présente les différences entre les deux modèles pour la localisation des maximums d'ozone au sol. En terme de distribution des concentrations d'ozone au sol, la différence entre les modèles CHIMERE et Metphomod est importante, comme le montre la figure 2-18. Alors que CHIMERE diagnostique des niveaux d'ozone importants dans un panache au sud de l'agglomération grenobloise, Metphomod prévoit des concentrations importantes sur les pentes des massifs montagneux. CHIMERE et Metphomod utilisent un calcul de déposition sèche et des mécanismes assez similaires bien que MELCHIOR 2 soit un mécanisme simplifié, par contre le calcul des coefficients de diffusion sur la verticale sont différents.

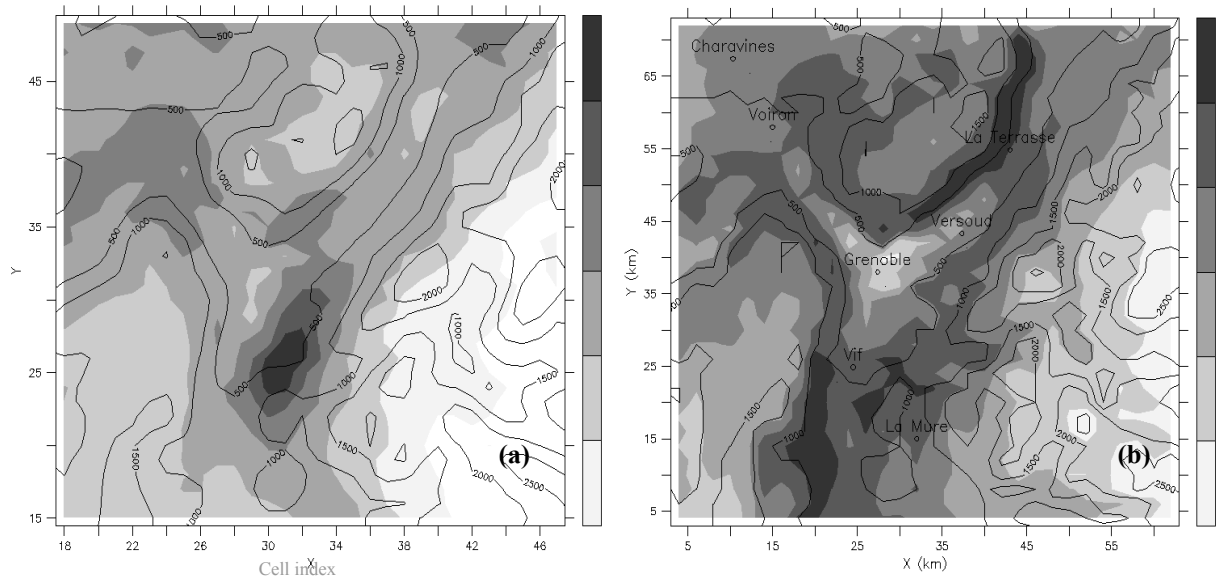


Figure 2-18. Cartes des moyennes des maximums journaliers d’ozone (en $\mu\text{g m}^{-3}$) du 1^{er} au 15 août 2003 simulées par CHIMERE (a) et Metphomod (b). Les isocontours représentent l’altitude du sol MM5 (a) et de Metphomod (b).

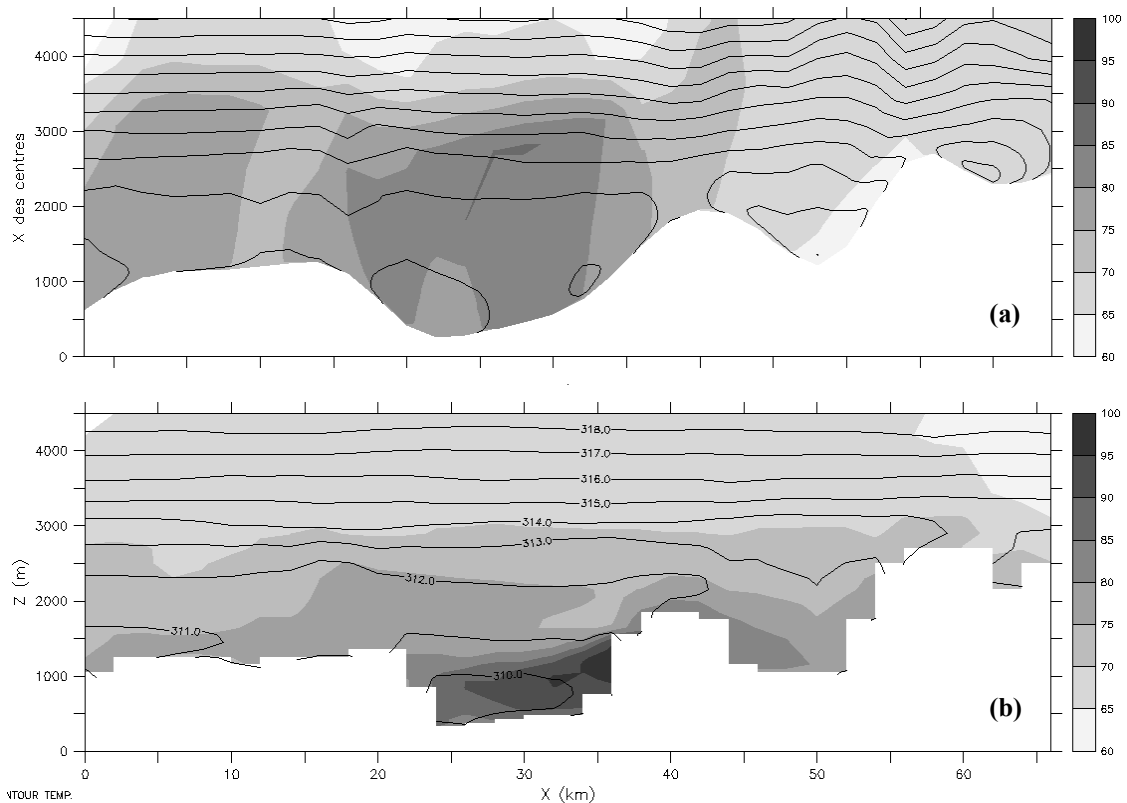


Figure 2-19. Section transverse à la vallée du Drac (sud de l’agglomération grenobloise) dans la direction O-E à la latitude $45^{\circ}10'$. Les concentrations en ozone (en ppbv) simulée par CHIMERE (a) et Metphomod (b) sont en échelle de gris. La température potentielle en contours (intervalles de 1 K) calculée par MM5 (a) et Metphomod (b).

Mélange vertical

Le mélange vertical dans le modèle CHIMERE est basé sur le calcul du coefficient de diffusion vertical K_z . Ce coefficient est calculé selon la paramétrisation de [Troen and Mahrt, 1986]. Cette paramétrisation fournit un profil vertical de K_z en fonction du nombre de Richardson. Ce coefficient K_z est dans le terme de diffusion de l'équation (2.41) pour le calcul des concentrations c_i de l'espèce i suivant la verticale.

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + w \frac{\partial c_i}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial (K_z c_i)}{\partial z} \right) + S_i(x, y, z, t) \quad (2.41)$$

Le calcul de K_z dans CHIMERE fait intervenir la hauteur de CLA diagnostiquée par MM5. La surestimation de la hauteur de la CLA par MM5 conduit à une surestimation de K_z et de la diffusion. Appliquée dans les vallées alpines, cette approche conduit à la formation de cheminées au-dessus des pentes comme le témoigne le résultat du calcul de la figure 2-19a. Le calcul CHIMERE (en haut) est comparé à un calcul avec Metphomod avec les mêmes caractéristiques (même résolution horizontale, même période, mêmes émissions, même forçage dynamique MM5, etc.). Il apparaît que CHIMERE tend à mélanger de manière importante l'ozone au centre de la vallée et au-dessus des pentes. Le mélange au-dessus des pentes n'est pas en accord avec les isocontours de température potentielle qui montre que l'atmosphère est stable au-dessus de 3000 m. En comparaison, Metphomod qui calcule des coefficients de mélange à partir de l'énergie cinétique turbulente (TKE), ne réalise pas de mélange au-dessus de 3000 m. La résolution utilisée dans le modèle CHIMERE, selon 8 niveaux du sol à 500 hPa, ne semble pas adaptée à la description des vallées à fine échelle. Afin d'utiliser le modèle CHIMERE à fine échelle, les deux recommandations principales sont d'utiliser une définition de niveaux verticaux respectant la circulation en couches de la vallée (vue dans la partie 1.2.2) et de réaliser directement le calcul de K_z à partir des valeurs de l'énergie cinétique turbulente (TKE) calculées par MM5.

Performances et portabilité

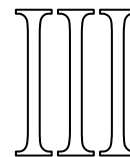
Bien que MM5 ait été utilisé avec succès à une résolution de 1 km pour l'étude de la vallée de Chamonix [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005], il a été choisi de ne pas utiliser MM5 à des résolutions horizontales plus fines que 6 km dans la chaîne PREVALP. Ce choix a été motivé par trois raisons. Tout d'abord, une comparaison des résultats de MM5 et de Metphomod à une résolution horizontale de 2 km sur la POI 1 de GRENOPHOT 99 a montré que les deux modèles décrivaient de manière correcte le système de vent de vallée (figure 2-5). Cela ne donnait pas d'avantages à MM5. Ensuite étant donné que les schémas de mélange turbulent de CHIMERE posaient des questions de validité en terrain complexe, le choix de MM5 n'était pas justifié par le calcul chimique. Enfin, les ressources en calcul dont MM5 a besoin à des résolutions fines sont bien plus importantes que celles de Metphomod. Le tableau

2-12 fournit les temps de calcul caractéristiques pour différents domaines avec les différents modèles de la chaîne sur une machine équipée de deux processeurs AMD® Athlon cadencés à 1,8 GHz. Dans un souci de portabilité de la chaîne vers des machines Linux de bureau, la chaîne PREVALP ne devait pas faire appel à des ressources en calcul trop importantes telles des clusters. Cette philosophie a guidé le choix des composants et le développement des interfaces afin de disposer d'un outil rapide, léger et portable. Dans un souci de rapidité, les calculs prenant le plus de temps (météo MM5, calcul chimique de Metphomod) utilisent des codes faisant appel à des langages de calcul parallèle tel Message-Passing Interface (MPI) ou Parallel Virtual Machine (PVM).

Tableau 2-12. Temps de calcul pour les différents modèles de la chaîne sur une machine à deux processeurs AMD® Athlon 1,8 GHz

modèle	MM5		CHIMERE		Metphomod	
compilateur	IFC 7		GNU fortran		GNU C	
nombre de processeurs utilisés	2		1		2	
domaine(s)	France, Rhône-Alpes	France, Rhône-Alpes, Grenoble	France	Rhône-Alpes	Rhône-Alpes	Grenoble
résolution (km)	18 et 6	18, 6 et 2	18	6	6	2
temps de calcul pour une journée de simulation (en h)	2,5	5	0,25.	0,4	1	3

Avant d'être utilisée pour l'étude de processus, la chaîne de calcul a été validée sur différentes périodes. Le chapitre 3 présente la validation de la chaîne de calcul à l'aide des données de deux campagnes de mesure traitant de la dynamique de l'atmosphère et de sa photochimie soit en terrain montagneux (GRENOPHOT 99) soit en terrain côtier (ESCOMPTE).



Chapitre 3. Validation du système PREVALP sur les expériences GRENOPHOT 99 et ESCOMPTE

La plupart des validations des modèles de chimie transport sont réalisées grâce à des données d'une ou plusieurs expériences de terrain de durée allant de quelques heures à plusieurs années. Ces expériences comprennent de nombreuses mesures spécifiques à différents processus physiques du modèle. On citera de manière non exhaustive : les mesures de flux dans le sol et à l'interface sol/air, les mesures en trois dimensions des paramètres de dispersion et du transport, les mesures chimiques au sol et en trois dimension, les mesures de dépôt au sol. Dans le cas des modèles utilisés au sein de PREVALP, ceux-ci ont été validés sur la région Rhône-Alpes à l'aide de deux jeux de données : ceux de l'expérience GRENOPHOT 99 décrite par Couach et al. [2003] et du programme POVA décrit par Jaffrezo et al. [2005]. Le recours à des expériences de terrain est obligatoire car il est impossible de s'assurer du bon fonctionnement de certaines paramétrisations du modèle avec les mesures disponibles en routine. L'objet de ce chapitre est de présenter une validation du système de modélisation PREVALP grâce à des données des expériences GRENOPHOT et ESCOMPTE. Cette validation sur deux sites de la chaîne PREVALP permettra d'apprécier la robustesse de l'interfaçage des modèles, des paramètres de sol, du transport, de la dispersion et du couplage chimique avec différentes topologies. L'expérience ESCOMPTE a montré que les phénomènes mis en jeu dans la dynamique de l'atmosphère étaient très semblables à ceux observés dans les vallées. Les phénomènes locaux générés par le relief et la présence de grandes étendues d'eau sont les brises de terre et de mer avec leurs fronts associés, les vents de pente et la canalisation du vent par les vallées. L'interaction de différents systèmes de brises (brise profonde et brise peu profonde) va créer une stratification de l'atmosphère selon plusieurs couches avec des propriétés physicochimiques différentes.

Afin de limiter l'utilisation des données et leur mise en forme, nous nous concentrons sur certaines mesures spécifiques. L'expérience GRENOPHOT fournit d'assez bonnes mesures avion, LIDAR et profileur de vent mais ne disposait pas de mesures de flux au sol. Afin de valider le calcul des flux de Metphomod, nous utilisons les mesures de flux réalisées lors d'ESCOMPTE. Les mesures issues de ESCOMPTE utilisées pour la validation sont :

- les mesures de radiation IR et visibles qui permettent de s'assurer que le modèle reproduit bien la quantité d'énergie reçue par le sol et réémise sous forme de rayonnement IR ou visible (figure 1-2) ;
- les mesures de flux de chaleur dans le sol qui permettent de valider le schéma de diffusion thermique dans le sol et les mesures de flux latent et de flux sensible entre le sol et l'atmosphère ;
- les mesures de flux de différentes espèces chimiques entre le sol, la canopée et l'atmosphère, la déposition sèche et humide ;
- les mesures en trois dimensions de l'ozone ou du vent grâce à des systèmes SODAR, radar UHF et LIDAR fixes pour vérifier de la description de la stratification verticale de l'atmosphère.

Les mesures issues de GRENOPHOT utilisées pour la validation sont :

- les mesures en trois dimensions de l’ozone ou du vent grâce à des systèmes SODAR, radar UHF et LIDAR fixes. Ces mesures permettent d’avoir accès à une structure en trois dimensions de l’atmosphère variant dans le temps ;
- les mesures aéroportées de la température, du vent, de l’humidité, de l’ozone et des aérosols qui complètent les mesures précédentes grâce à la mobilité géographique de l’aéronef ;
- les mesures des espèces chimiques qui entrent en jeu dans la chimie de l’ozone et des aérosols tels les composés organiques, les aldéhydes, cétones, PAN et acides nitriques.

3.1. Modélisation de la POI 1 de GRENOPHOT (25 au 27 juillet 1999) à l’aide de la chaîne de modèles PREVALP

Après un court rappel des efforts de modélisation réalisés sur le site grenoblois ces dernières années, cette partie fournit un descriptif de la campagne GRENOPHOT 99 et des principaux aspects de la dynamique de l’atmosphère et de sa photochimie sur le site grenoblois. Les résultats du modèle Metphomod au sein de PREVALP apportent ensuite des explications sur quelques phénomènes qui n’avaient pas été expliqués auparavant.

3.1.1. Historique de la modélisation à Grenoble

L’agglomération de Grenoble, située au confluent des vallées du Drac et de l’Isère possède une circulation atmosphérique souvent découplée de la circulation synoptique dans l’atmosphère. Ce découplage est engendré par la topologie du site grenoblois qui est souvent qualifié de « cuvette ». Le projet TEPAG (Transports et Evolution de Pollutions sur l’Agglomération Grenobloise) a été lancé en 1992 avec pour but d’améliorer les connaissances sur l’évolution des pollutions sur le site de Grenoble et de déboucher, à terme, sur des outils d’aide à la gestion de la qualité de l’air à partir du code ARPS (*Advanced Regional Prediction System*). Ce projet a mis en avant le fait que les mouvements atmosphériques sur le site de Grenoble sont peu sensibles aux régimes synoptiques, particulièrement au cours des périodes anticycloniques et donc critiques en terme de pollution photochimique ou de situation d’inversion de température en période hivernale [Guilbaud, 1996]. Ce projet s’est arrêté à des simulations météorologiques avec l’application à la dispersion de traceurs passifs [Machado Da Silva, 1998]. Le projet GRENOPHOT initié par l’Association pour le Contrôle et la Préservation de l’Air dans la Région Grenobloise (ASCOPARG) en 1998 visait à étudier la pollution photochimique de l’agglomération à l’aide de campagnes de mesures intensives et d’un modèle méso-échelle météorologique et de chimie transport (CTM). Au cours de l’été 1999, l’ASCOPARG, conjointement à l’Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), a mené une campagne de mesures en déployant,

durant un mois, un réseau de mesures au sol renforcé par des moyens de mesures à la verticale. Deux Périodes d'Observations Intensives (POI) ont eu lieu, la première fin juillet, et la deuxième début août. Les simulations ont été réalisées pour la première POI (25-27 juillet) avec le modèle Metphomod. Le modèle a mis en évidence le déplacement horizontal du panache d'ozone vers le sud de l'agglomération durant la journée. Sur la verticale, les mesures et les simulations montrent une couche de mélange convective (CLC) supérieure à 2000 m, le transport horizontal du panache dans la CLC et la formation de la couche réservoir d'ozone. La journée du 27 juillet a cependant posé un problème car, malgré une couverture nuageuse, les niveaux d'ozone mesurés étaient les plus forts de la POI. La détection d'ozone en altitude par le LIDAR a conduit à l'hypothèse que cet ozone avait une composante transportée à longue distance. L'utilisation de la chaîne PREVALP sur cet épisode permet de mieux prendre en compte le transport d'ozone à des échelles plus grandes que la région.

3.1.2. La campagne GRENOPHOT 99

La campagne GRENOPHOT a apporté une connaissance des phénomènes gouvernant la production d'ozone dans la cuvette grenobloise. Les différentes mesures ont été analysées par Couach [2002;2003;2004] de manière exhaustive. La modélisation eulérienne de la dynamique de l'atmosphère et de la chimie appliquée par Olivier Couach a été incorporée à la chaîne PREVALP comme l'a montré la partie 2.3. Afin de valider la chaîne sur la cuvette grenobloise, les données de GRENOPHOT ont été utilisées. Dans la partie suivante, on présente une validation de certains résultats de la chaîne sur la POI 1 de GRENOPHOT soit les 4 jours du 24 au 27 juillet 1999. Après cette validation, les deux types de mélanges verticaux impliqués dans cette étude sont décrits : le mélange convectif associé à un vent de vallée libre (25 et 26 juillet 1999) et le mélange associé à un épisode de vent de sud (27 juillet 1999). Le premier cas correspond à des journées où le vent de vallée se développe normalement sans interaction avec le vent synoptique. Ce cas est représentatif de la plupart des journées estivales par conditions anticycloniques. Le second cas correspond à une journée où le vent synoptique a interféré avec le vent de vallée. L'occurrence de ce phénomène est plus rare que le premier cas mais le mélange vertical induit étant bien plus efficace, il est intéressant de l'étudier. Des simulations réalisées sur d'autres épisodes (août 2003, juin 2002) et présentées plus loin dans le manuscrit montreront que ce phénomène n'est pas un cas isolé mais est simulé à plusieurs reprises lors de ces épisodes. Cette circulation mettant en jeu un front de vent de vallée conduit à une répartition particulière de l'ozone au sol dans la cuvette grenobloise (moins d'ozone au sud, plus d'ozone au nord). Ces deux cas de circulation permettent également de tester l'interaction entre les modèles MM5, CHIMERE et Metphomod dans des situations où la vallée est découplée (cas 1) ou non découplée (cas 2) du régime synoptique.

Chaque vallée possède des caractéristiques différentes des autres. Les interactions des divers systèmes de vents de vallée vont créer une dynamique de l'atmosphère très complexe. Par régime anticyclonique, les hétérogénéités de sols dominent la circulation atmosphérique et l'occupation des sols est un paramètre clé pour la description des régimes de vents locaux dans les vallées. Avant même d'appliquer un modèle de chimie transport, la compréhension des phénomènes dynamiques est déterminante.

3.1.3. Phénomènes de mélange et de transport des vallées du Y grenoblois

La figure 3-1 schématise les trois circulations (synoptique, synoptique influencée et régimes de vent de vallée) contrôlant la dynamique de la cuvette grenobloise dans le cas d'un régime anticyclonique de nord-est. Dans le cas de Grenoble, les maximums d'ozone sont observés de manière générale dans le panache de l'agglomération situé quelques dizaines de kilomètres au sud de l'agglomération dans la vallée du Drac. Un autre panache est observé au nord entre les massifs de Belledonne et de la Chartreuse (station de mesure du Versoud) mais de manière non régulière.

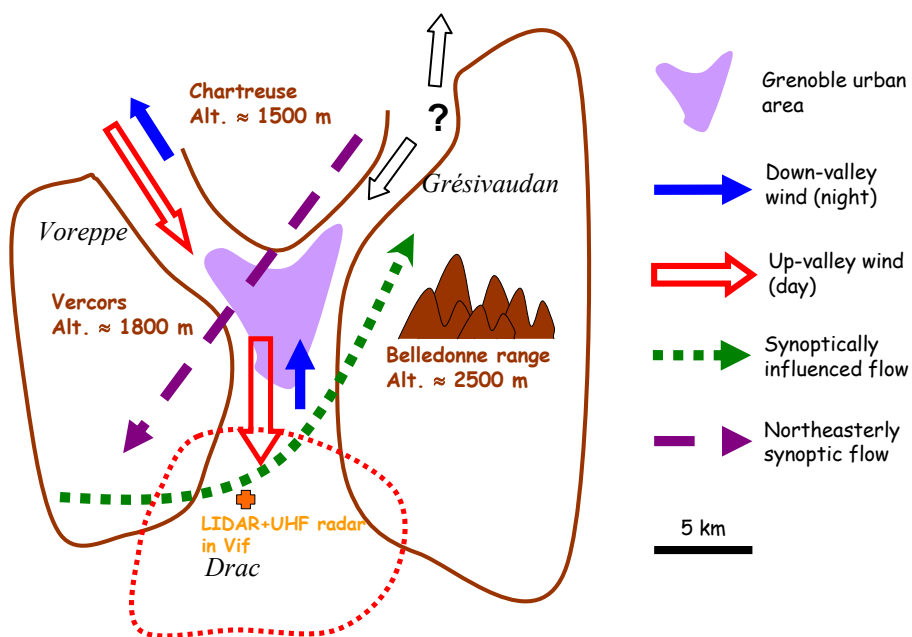


Figure 3-1. Schéma de la circulation atmosphérique dans la cuvette grenobloise en régime anticyclonique

Le Y grenoblois est situé au confluent des vallées du Drac et de l'Isère. Chaque vallée possède son propre régime de vent de vallée et ces régimes interagissent entre eux. Les paramètres déterminant le développement du vent de vallée sont l'orientation générale de la vallée, sa largeur et l'inclinaison des pentes. Le tableau 3-1 résume les caractéristiques des régimes de vents locaux des différentes vallées du Y grenoblois qui se développent lors d'une journée d'août.

Tableau 3-1. Caractéristiques des régimes des vallées et cluses du Y grenoblois pour une journée d'août

Vallée	Type de vent	Heure début HL	Durée de mise en place	Hauteur de couche	Direction moyenne
Grésivaudan	nuit	indéterminé	indéterminée	indéterminée	tournant
(Versoud)	jour	variable	variable	variable	60° (NE)
Cluse Voreppe	nuit	21:00	30 min		150° (S)
(Voreppe)	jour	12:30	1 h		330° (N)
Basse vallée du	nuit	21:00 – 22:00	3 h	800 m	180° (S)
Drac (Vif)	jour	12:00	1 h	1800 m	0° (N)
Romanche	nuit	21:00	3 h	?	10° (N)
(Riouperoux)	jour	10:00 – 11:00	3 h	?	190° (S)

La vallée du Drac s'ouvre sur le plateau du Trièves (figure 3-2), un large plateau situé à une altitude moyenne de 700 m et limité par les massifs du Vercors à l'ouest et de l'Oisans et du Dévoluy à l'est. La vallée du Drac et le plateau du Trièves sont les deux « bassins » de génération du vent de vallée observé à Grenoble. En régime anticyclonique, les vents de pentes se développent sur les versants bordant le Drac et le Trièves. Ces vents génèrent un vent de vallée soufflant de Grenoble vers le sud.

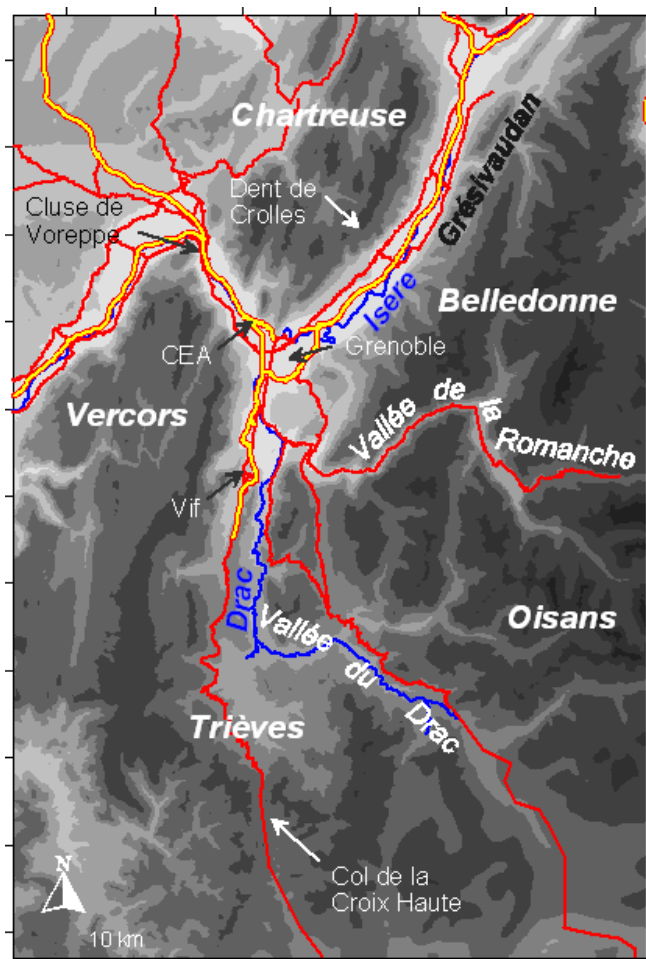


Figure 3-2. Topographie du Y grenoblois avec les principales routes, massifs montagneux et vallées

Ce vent de vallée va mettre en mouvement l'air dans la cluse de Voreppe et dans le Grésivaudan. La vallée de la Romanche située au sud-est de l'agglomération et ouvrant un passage étroit entre la chaîne de Belledonne et l'Oisans joue certainement un rôle dans le régime de vent de vallée mais aucune mesure n'a pour l'instant établi les échanges entre la vallée du Drac et la vallée de la Romanche. La vallée de la Romanche étant une vallée particulièrement étroite, la circulation des masses d'air dans la vallée est beaucoup plus faible que dans les autres vallées citées ci-dessus. Le tableau 3-1 résume les heures et les hauteurs des vents de vallées dans les différentes vallées du Y grenoblois. Selon les largeurs des vallées et leurs pentes, le vent de vallée à une vitesse plus ou moins importante. Les horaires des bascules varient selon la saison mais

varient assez peu en fonction des conditions synoptiques (direction du vent en altitude). Les résultats du tableau 3-1 ont été obtenues par l'étude de données de vent à des stations fixes et à partir des données du profileur de vent installé à Vif durant l'expérience GRENOPHOT. Le Grésivaudan est une vallée assez large qui est connectée à quatre vallées (deux au sud et deux au nord). Cette topologie particulière semble générer un large panel de circulations et aucune circulation « type » n'a pu être dégagée.

La cluse de Voreppe

L'arrivée à Grenoble par Voreppe permet d'admirer les falaises abruptes dominant la cluse. Les masses d'air venant de l'ouest pénètrent dans le Y grenoblois par cette ouverture entre les massifs du Vercors et de la Chartreuse (figure 3-2). Cette vallée est longue d'un peu plus de 5 km et large de 1 km en son fond. Ses versants sont abrupts côté Vercors et plus doux du côté de la Chartreuse. A cause de sa faible longueur, la cluse de Voreppe ne développe pas un régime de vent de vallée propre à elle-même mais la circulation des masses d'air est dominée par l'extérieur. La cluse canalise les vents de vallée se développant dans les autres branches du Y et les masses d'air provenant de l'ouest. Cette canalisation s'accompagne d'un effet venturi si bien que la cluse de Voreppe est souvent la branche du Y grenoblois où le vent est le plus fort même par régime stagnant.

Un mât météorologique opéré par le CEA se trouve à l'embouchure de la cluse, à la confluence du Drac et de l'Isère. Ce mât est destiné à la collecte de données météorologiques pour le calcul de la dispersion d'espèces radioactives en cas d'accident nucléaire sur le site du Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble (CENG). La force du vent est mesurée aux altitudes 10, 20, 40, 60, 80 et 100 m au-dessus du sol grâce à des anémomètres à boules. La direction du vent est mesurée à 10, 30, 70 et 100 m grâce à des girouettes mécaniques et la température de l'air est mesurée à 2, 20, 40, 60, 80 et 100 m. La figure 3-3 fournit la direction du vent mesuré à 10 m pour une journée de février 2005 et une journée d'août 2003. Le vent dans la vallée prend deux directions : nord et sud. Le vent de nord à une direction 330° et lors de ce régime de vent la force du vent à 40 m est plus faible que celle à 10 et 20 m. Cet effet est expliqué par la présence au nord du mat de l'Isère qui a tendance à accélérer le vent dans les très basses couches sur une hauteur inférieure à 40 m. Le vent de sud de direction 150° a un profil de vent classique, observé avec des vitesses de vent décroissantes avec la hauteur. Ce profil semble représentatif du profil de vent créé par l'agglomération grenobloise en amont de l'écoulement. Tout au long de l'année, notamment par conditions anticycloniques, on observe une bascule du vent au niveau du mât à des heures qui dépendent de la saison. En août, la bascule a lieu à 12 h 30 et 21 h HL en moyenne, alors qu'en février, elle a lieu à 14 h et 21 h HL en moyenne comme le montre la figure 3-3 pour deux journées représentatives de conditions anticycloniques en hiver et en été. Les mesures ont montré une variabilité plus

importante des heures de bascule en hiver qu'en été. Cette variabilité s'explique par le fait que les phénomènes thermiques à l'origine du vent de vallée sont moins importants en hiver qu'en été à cause surtout d'une radiation solaire réduite. Le vent en altitude et les canalisations de ce vent dans les différentes vallées jouent alors des rôles plus importants dans la dynamique de l'atmosphère des différentes vallées en hiver.

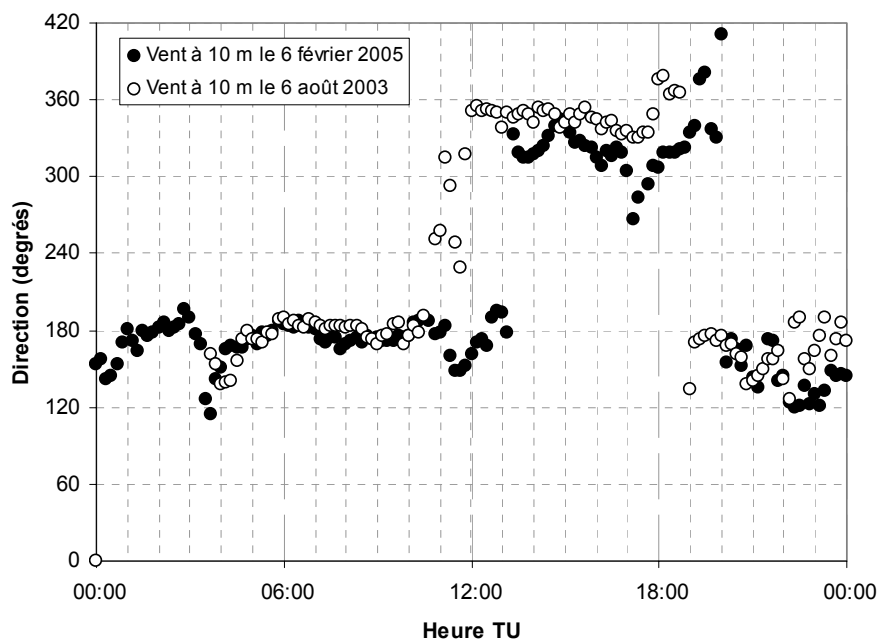


Figure 3-3. Direction de vent mesurée sur le mât du CEA pour une journée hivernale et une journée estivale

Les profils de température issus des mesures de température du mât permettent de déceler la présence d'inversions thermiques dans la zone où se trouve le mât. Cependant une réserve est faite quant au calcul de gradient par vent de nord où l'on a vu que les profils de vent étaient fortement influencés par le terrain situé juste en amont de l'écoulement. Cette direction est importante car en cas d'incident nucléaire sur le site du CENG, les espèces radioactives seraient transportées vers le centre de Grenoble. Les mesures du mat sont moyennées sur 10 minutes. Cette période permet de faire apparaître des oscillations dans les mesures de vent. Ces oscillations ont des périodes différentes selon la saison. Des oscillations du gradient thermique vertical de période 1 h 30 en été et 2 h en hiver sont observées par régime de vent de vallée nocturne. Ces oscillations traduisent la déstabilisation de l'atmosphère par un vent de vallée « froid » soufflant au-dessus de l'agglomération grenobloise. Deux phénomènes peuvent être à l'origine de ce phénomène. Le premier phénomène est lié à la présence de l'îlot urbain de Grenoble. Le refroidissement du sol entraîne la création d'un gradient $\partial T/\partial z$ positif (stratification très stable) dans les premières dizaines de mètres au-dessus du sol. Au-dessus la température est contrôlée par la circulation en amont du mât. Par vent nocturne de sud, cette circulation est influencée par l'îlot urbain de Grenoble qui se trouve en amont. L'interaction des vents de pentes du Y, et des vents des autres vallées du Y grenoblois avec l'îlot urbain

plus chaud pourrait générer des changements de température du vent soufflant dans la cluse de Voreppe. Ces oscillations sont visibles sur la vitesse du vent de manière moins évidente. La seconde explication est la formation d'ondes internes liées aux vents de pentes. Les mesures mettant en évidence des ondes internes générées par le relief en stratification stable restent assez rares à cette échelle [Tavernier, 2006]. Ce phénomène d'oscillations est illustré avec des mesures dans la partie 4.2.1 pour un épisode de février 2005.

Le mélange local du Grésivaudan

Le Grésivaudan est une vallée orientée SO-NE avec au nord la Chartreuse et au sud le massif de Belledonne (figure 3-2). A cause des formations géologiques différentes des deux massifs, l'imposante barrière calcaire du Vercors s'oppose aux douces pentes des contreforts de Belledonne. La dent de Crolles est la formation la plus caractéristique avec son grand mur calcaire de plus de 400 m de haut parcourue par des voies d'escalade historiques [Coupé, 1986]. Le site du plateau des Petites Roches, situé à mi-pente entre la Dent de Crolles et le fond de la vallée est un site de renommée internationale pour la pratique du parapente et du vol à voile. Tous les ans a lieu le rassemblement de la Coupe Icare. Le site de Saint-Hilaire du Touvet sur le plateau est situé juste en dessous de la dent de Crolles et au-dessus de la falaise calcaire dominant Crolles. Cette falaise orientée sud-est, échauffée par le soleil, génère des thermiques réguliers qu'exploitent les parapentistes. Ces ascendances sont d'autant plus régulières que la vallée du Grésivaudan est large et que le vent dans l'axe de la vallée est faible par conditions anticycloniques. Dans le fond de vallée, l'Isère suit son cours avec des méandres assez nombreux. Sur le fond de vallée très plat, à 250 m d'altitude, de nombreux lacs et étangs y sont aménagés. Le reste des terrains sont souvent non constructibles car gorgés d'eau. Les seuls terrains au centre de la vallée occupés par l'activité humaine sont des champs et les agglomérations se sont développées à proximité des versants. Les brouillards et les nuages bas sont fréquents dans le Grésivaudan de part l'importante teneur en eau du sol. Sur les coteaux au nord de l'Isère, la vue sur la chaîne de Belledonne est magnifique, ce qui a fait de cette rive droite de l'Isère un endroit de villégiature très prisé des Grenoblois. La rive gauche de l'Isère et les contreforts de Belledonne se composent de collines boisées à basse altitude qui laissent place plus haut à la moyenne montagne et ses paysages de végétation rabougrie. Au-dessus de 2000 m, les montagnes de Belledonne sont entièrement dénudées d'arbres, couvertes d'herbe rase et de neige une bonne partie de l'année [Shashahani, 2001]. Le point culminant du massif, la croix de Belledonne (2926 m) se trouve à 10 km à vol d'oiseau du centre de la vallée. En comparaison, la dent de Crolles, qui culmine à 2062 m, se trouve à 5 km à vol d'oiseau du centre de la vallée.

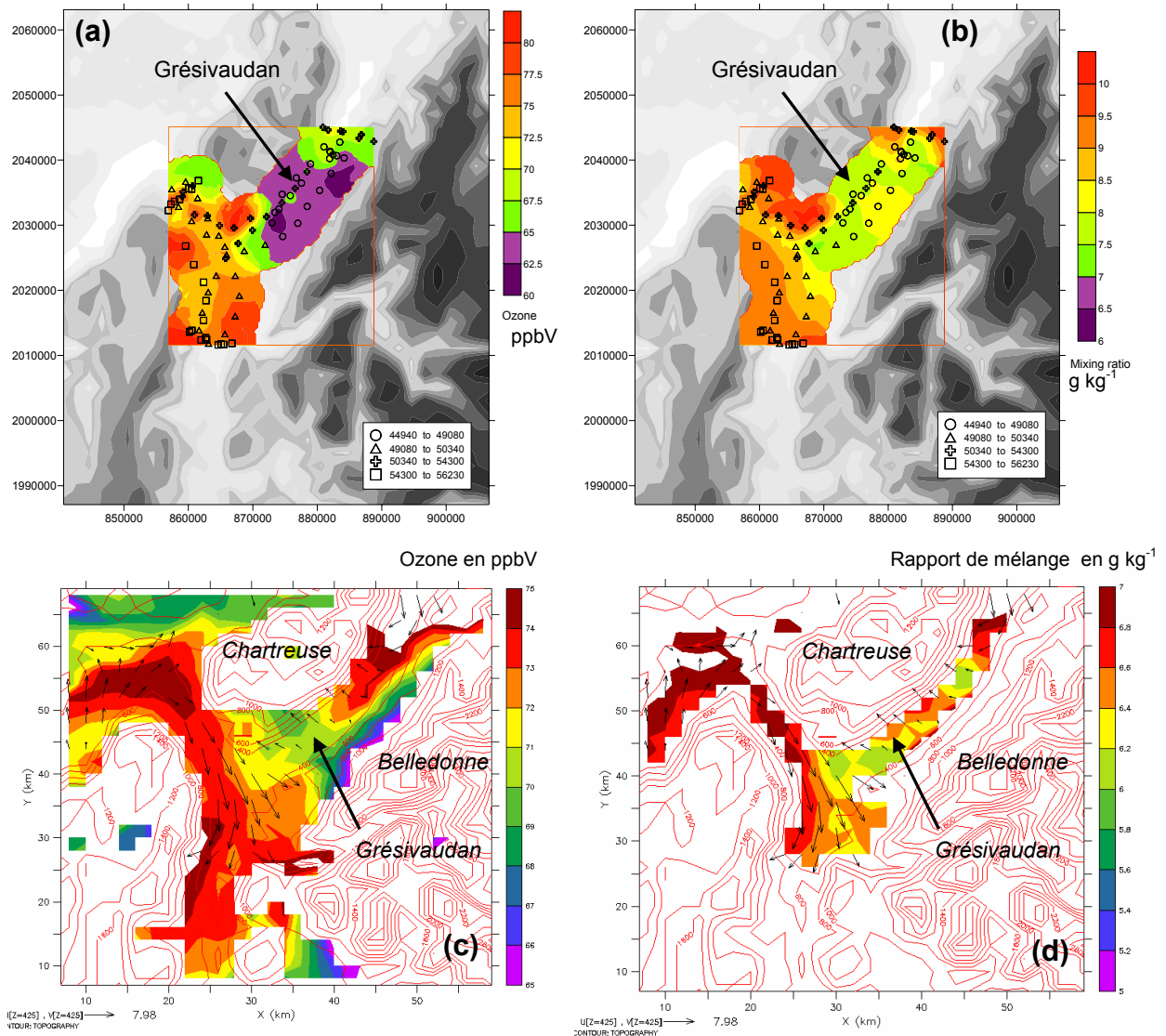


Figure 3-4. Ozone (a) et rapport de mélange en vapeur d'eau (b) mesurés entre 1000 m et 1800 m par l'avion MetAir le 26/07/1999 entre 12:30 et 15:30 TU interpolés par krigeage à partir des mesures (points). Ozone (c) et rapport de mélange en vapeur d'eau (d) moyens simulés par Metphomod à ces altitudes

En considérant cette topologie et le type de sol, les falaises de la Chartreuse vont avoir tendance à s'échauffer très vite le matin (rocher nu, orientation sud-est), d'autant plus vite que le sol est sec. Le fond de vallée, où l'Isère a son lit, est plus humide et aura tendance à se réchauffer plus tardivement. Le matin, les versants nord ouest de Belledonne sont à l'ombre et les catabatiques qui se créent sur ces versants pendant la nuit apportent de l'air frais sur la rive gauche de l'Isère. Ces hétérogénéités créent un gradient de température horizontal transverse à la vallée qui va entraîner l'air de la rive gauche de l'Isère vers sa rive droite, puis l'élévation de cet air en altitude dans les thermiques empruntés par les parapentistes à Saint-Hilaire. L'élévation des falaises par rapport au fond de vallée accentue ce phénomène. Les nuages cumulus qui se forment l'été dès la fin de matinée au sommet de la dent de Crolles témoignent de ce phénomène de convection. Plus tard en journée, le réchauffement des pentes de

Belledonne va générer un gradient de température sur la rive gauche qui va entraîner la formation de vents de pente. Ces vents, vu la morphologie des pentes, sont moins intenses que les thermiques sur la face SE de la Chartreuse. L'air qui est entraîné en fond de vallée provient alors de la verticale (approximativement) du fond de vallée comme illustré sur la figure 3-4. Il faut attendre que les falaises sud-est de la Chartreuse soient à l'ombre pour que les vents de pente de Belledonne parviennent à attirer de l'air sur la pente nord-ouest. Les observations aéroportées Metair de la figure 3-4 réalisées en juillet 1999 entre 1000 m et 1800 m mettent en évidence ce phénomène. On remarquera sur les résultats Metair que les mesures réalisées au début et à la fin du vol montrent le même phénomène (air sec et pauvre en ozone) avec peu de changements. Ces observations sont comparées avec les résultats du modèle Metphomod sur la figure 3-4. Le modèle prend en compte l'angle d'incidence de la radiation solaire avec le sol et est capable de décrire l'ensoleillement variable des deux versants. L'utilisation de bons paramètres de sol reproduisant correctement l'hétérogénéité entre les zones arides, rocheuses et les zones humides, permet d'observer cette circulation. Les échanges verticaux ne l'emportent pas pour autant sur les échanges horizontaux : le vent transversal à la vallée ne surpasse pas le vent axial. Sur le sondage MetAir réalisé au-dessus du Versoud le 26 juillet 1999, une couche de vent de sud est visible (couche d'injection) au-dessus de 2000 m à 7h30 TU et s'abaisse à 1100 m à 12h30 TU (figure 1-11).

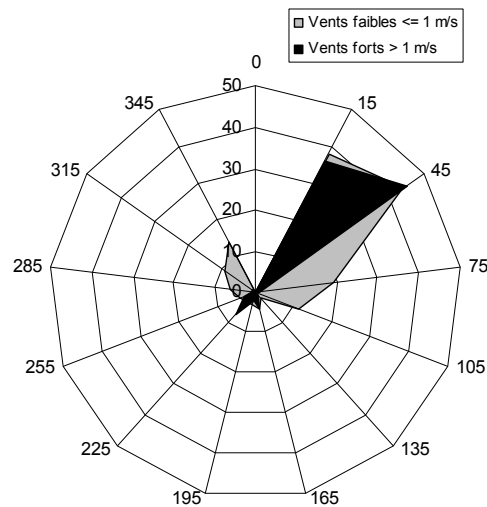


Figure 3-5. Rose des vents au Versoud du 1^{er} au 15 août 2003 (données horaires de vent)

La rose des vents de la figure 3-5 à la station du Versoud, située en fond de vallée témoigne de la canalisation du vent dans l'axe de la vallée. Le vent de nord-est y est prédominant. Dans ces conditions, les précurseurs d'ozone émis par l'agglomération de Grenoble ne devraient pas participer à former l'ozone mesuré au Versoud et les concentrations d'ozone mesurées au Versoud devraient rester inférieures à celles mesurées au sud de l'agglomération grenobloise. Ceci n'est pas vrai pour certaines journées où le maximum d'ozone est atteint à la station du Versoud alors que les autres stations mesurant l'ozone dans la cuvette (Saint-Martin d'Hères, Fontaine, Grenoble les Frênes, Champ-sur-Drac et Champagnier) mesurent des niveaux plus

faibles. Ces observations, réalisées chaque année par l'ASCOPARG, prouvent la complexité des circulations atmosphériques dans le Grésivaudan. La figure 3-5 montre qu'on observe également des vents transversaux à une fréquence faible. Ces vents pourraient amplifier le mélange des polluants, accélérer la production d'ozone interne à la vallée et ramener au sol de l'ozone présent dans la couche d'injection. Les émissions de précurseurs de l'ozone internes à la vallée (autoroute A41, trafic local et industries) et les émissions biogéniques des forêts situées sur les versants pourraient jouer un rôle important dans la production d'ozone dans le Grésivaudan. Les effets des émissions locales sont ressentis lorsque les vitesses impliquées dans le mélange vertical sont du même ordre de grandeur que la vitesse du vent dans l'axe de la vallée. Les termes de diffusion et de transport de l'équation (2.41) sont alors du même ordre de grandeur. Ce phénomène de mélange local n'est pas observé dans les deux autres vallées du Y. Par exemple, dans la cluse de Voreppe, la vitesse de vent horizontal est trop importante pour que les déplacements verticaux générés par des phénomènes convectifs soient observables.

La vallée du Drac

Dans la vallée du Drac, au sud de Grenoble, la morphologie des massifs est similaire à la morphologie du Grésivaudan : le Vercors oppose des falaises orientées à l'est alors que la région sur le versant opposé de la vallée du Drac, la Matheysine, possède des reliefs à pente douce (figure 3-2). On s'attend à observer un phénomène identique le matin lorsque les falaises du Vercors sont échauffées et attirent l'air de fond de vallée en altitude. Cependant ce phénomène dure moins longtemps car les reliefs en rive droite du Drac passent rapidement au soleil, la vallée est assez large par rapport au Grésivaudan ce qui rend les échanges de masses d'air plus inertes et le vent de vallée se développe rapidement à partir de 12h00 HL et masque les mouvements verticaux en fond de vallée. De plus l'occupation des sols est beaucoup plus homogène. L'agglomération de Grenoble située en fond de vallée va échauffer très vite l'air et former des cellules de convection. Plus tard en journée, une circulation classique de vent de vallée s'installe dans le sud de l'agglomération grenobloise et dans toute la vallée du Drac avec des ascendances sur les versants ensoleillés et une subsidence en milieu de vallée. Ce phénomène est observable à condition que la vallée soit assez étroite et que le vent de vallée ne compense pas totalement l'appel d'air des pentes. Une étude théorique des phénomènes de convection dans la vallée du Drac serait un exercice de modélisation intéressant. Il dépasse néanmoins le cadre de cette thèse dont l'objet est l'étude des processus liés à la pollution de l'air. Dans la vallée du Drac, un mélange important est observé très tôt en journée à cause de l'échauffement rapide du sol urbain et des thermiques sur les pentes E du Vercors. Ce mélange peut être observé sur les résultats MetAir et la simulation associée de la figure 3-4. Les gradients horizontaux sur les résultats MetAir peuvent être dus au fait que l'avion a mis un certain temps à survoler la zone (environ une heure) et qu'autour de 14h00 TU la hauteur

de la couche limite varie rapidement. Néanmoins la figure 3-4b a tendance à montrer que de l'air plus sec se trouve au centre de vallée, ce qui témoignerait de la présence d'une subsidence au centre de la vallée du Drac.

Conclusion sur GRENOPHOT 99

Après avoir détaillé les phénomènes caractéristiques des différentes vallées du Y grenoblois à l'aide de mesures et de quelques résultats du modèle Metphomod, la partie suivante fournit quelques éléments de la validation de la chaîne PREVALP sur l'épisode du 24 au 27 juillet 1999 étudié dans le cadre de GRENOPHOT.

3.1.4. Simulation numérique de la POI 1 de GRENOPHOT 99 avec la chaîne PREVALP

La POI 1 de GRENOPHOT99 a été étudiée et documentée par Couach [2002;2002;2003;2004]. Metphomod a été utilisé sur deux domaines imbriqués. Le forçage météorologique provenait du modèle opérationnel du service météorologique suisse ISM. Certains aspects de la dynamique de la vallée n'avaient pas été explicités par les simulations. On retiendra deux phénomènes qui restaient à expliquer.

1. une couche de vent de sud a été détectée sur les mesures aéroportées MetAir et sur le profileur de vent UHF entre 2000 m et 3000 m les 25 et 26 juillet 1999 visible sur le sondage de la figure 1-11. Cette couche est détectée sur la totalité du parcours de l'avion MetAir.
2. la journée du 27 juillet 1999 a vu les niveaux d'ozone les plus élevés des trois jours de la POI alors que le ciel s'est couvert tôt en journée et que les températures maximales étaient inférieures à celles des jours précédents. Des concentrations en ozone ont été mesurées par LIDAR à des altitudes importantes (supérieures à 3000 m) le 27 juillet comparées aux mesures des jours précédents

Dans un premier temps, le modèle MM5 a été utilisé pour simuler la météorologie du 21 au 28 juillet 1999 à l'aide des données du Centre Européen ECMWF. MM5 a calculé la météorologie pour cette période sur les deux domaines France et Région (figure 2-4). La résolution horizontale du petit domaine est de 6 km. Le modèle CHIMERE a été utilisé sur les deux domaines de calcul France et Région (figures 2-6 et 2-7), en se servant des sorties MM5 sur les domaines France et Région. Le calcul CHIMERE a été initialisé à l'aide de données climatiques MOZART. Le modèle Metphomod a été utilisé sur la période du 24 au 28 juillet 1999 avec le seul domaine de la figure 3-2. Cette approche est différente de celle de Couach [2002] qui a utilisé un grand domaine qui alimentait un petit domaine grâce à la technique de *one-way nesting*. La résolution à laquelle étaient disponibles les sorties météo MM5 et les

concentrations chimiques en espèces gazeuses MELCHIOR étant de 6 km, le passage à la résolution de 2 km n'a pas nécessité de passer par un domaine intermédiaire. Comme décrit dans la partie 2.4, la qualité des interpolations des variables de MM5 et de CHIMERE aux frontières de Metphomod permet ce passage sans causer d'instabilités aux frontières de Metphomod. L'utilisation d'un modèle comme CHIMERE qui prend en compte les apports d'ozone au niveau européen va permettre de comprendre si le transport longue distance a joué un rôle le 27 juillet dans les fortes concentrations d'ozone observées. La résolution de 6 km utilisé par MM5 pour décrire la météorologie régionale va permettre de résoudre la stratification à trois couches présentées dans le chapitre 1 (figures 1-10 et 1-11).

Les résultats du calcul Metphomod sont comparés aux mesures réalisées en 1999 à 8 stations au sol, aux résultats du LIDAR, du profileur de vent UHF et de l'avion MetAir. Pour plus de détails sur les mesures on se reportera à [Couach, 2002]. La figure 3-6 présente les résultats pour la direction du vent du profileur de vent de la société DEGREANE situé à Vif, comparés à la simulation du modèle. La simulation fait bien apparaître les trois couches de vent visibles sur les mesures. Le vent de sud mesuré par le profileur durant la journée entre les altitudes de 1600 m à 2800 m est détecté par le modèle les 25 et 26 juillet. Cette couche de vent de sud est visible entre le vent de vallée au-dessus du sol qui est de direction nord durant la journée et le vent synoptique qui était de direction nord-est les 25 et 26 juillet 1999. Le 27 juillet, le vent synoptique est passé au sud et la couche intermédiaire n'est plus visible. Les vitesses de vent dans cette couche sont faibles, de l'ordre de 2 à 3 m s⁻¹ comme indiqué sur le sondage de la figure 1-10 réalisé par l'avion MetAir à la verticale du Versoud le 26 juillet au matin. Cette couche va jouer un rôle déterminant dans la photochimie car l'ozone produit dans le panache de Grenoble au sud de l'agglomération est piégé sous cette couche mais va pouvoir également y pénétrer. Cette couche est appelée dans la littérature couche d'injection [Steinbacher, Henne, Dommen, Wiesen, and Prévôt, 2004] ou couche réservoir. Le cisaillement de vent à l'interface du vent de vallée et de la couche d'injection va créer une zone de vent nul où l'ozone va être stocké. L'ozone va ensuite être injecté dans la couche d'injection sous l'effet de la turbulence générée par le cisaillement. Ce mécanisme d'injection reste à être mieux caractérisé. Ce phénomène est néanmoins visible sur les mesures d'ozone par LIDAR de la figure 3-7 réalisées à Vif. Des poches d'ozones sont visibles les 25 et 26 juillet entre 18 h et 2 h du matin HL entre 1600 m et 2200 m. Des concentrations d'ozone élevées perdurent durant la nuit entre 1400 m et 2800 m, au sein même de cette couche réservoir. Cet ozone provient du panache de Grenoble qui, après avoir été transporté au sud au-dessus du plateau du Trièves par le vent de vallée, est injecté dans cette couche de sud et revient vers l'agglomération grenobloise. Cet ozone peut aussi être de l'ozone importé depuis des régions plus au sud, comme la région de Marseille et de la côte varoise. La discussion qui suit vise à mieux déterminer l'origine de l'ozone au sein de cette couche d'injection.

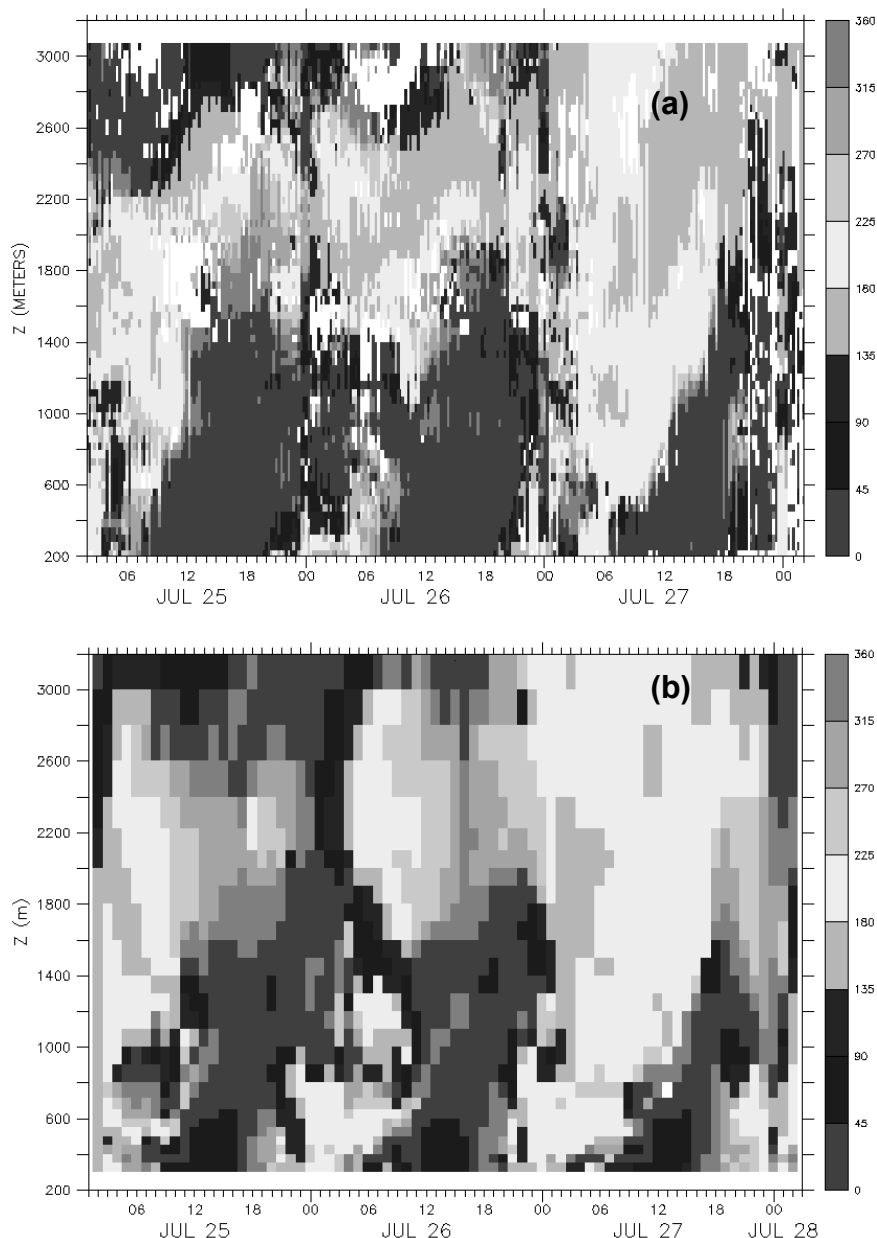


Figure 3-6. Coupe temps-hauteur de la direction du vent horizontal pour les 3 jours de la POI 1 mesuré par le profileur de vent DEGREANE (a) et calculée par le modèle (b) à Vif

Le modèle détecte assez bien la couche riche en ozone qui perdure tout au long des journées du 25 et 26 juillet (figure 3-7). Le modèle tend cependant à réaliser un mélange vertical trop important et à injecter de l’ozone à des altitudes supérieures à 3000 m, ce qui n’est pas évident de vérifier sur les mesures LIDAR. L’introduction d’une espèce passive O_3^R dans le modèle chimique correspondant à l’ozone entrant aux frontières de Metphomod permet de tracer l’ozone régional. En pratique, O_3^R est un traceur pris égal à l’ozone calculé par CHIMERE aux frontières de Metphomod. La figure 3-8 montre que l’ozone produit ($O_3 - O_3^R$) à partir des précurseurs émis dans le domaine participe aux concentrations d’ozone observées dans la couche réservoir. Cela prouve que l’ozone produit localement est injecté dans la

couche réservoir. De l’ozone local est présent durant la nuit au-dessus de l’agglomération grenobloise comme le montre la figure 3-8a. L’estimation de la part d’ozone local dans la couche réservoir est délicate et nécessiterait des simulations avec une résolution verticale plus fine que celle utilisée ici (la taille des mailles sur la verticale à 3000 m d’altitude est de 500 m). Les résultats numériques présentés ici affirment néanmoins qu’il est possible de simuler une telle couche réservoir. La part locale d’ozone est la plus importante dans le panache d’ozone aux heures les plus chaudes de la journée, entre 12 h et 18 h HL. Cette part locale atteint des valeurs de 25 % dans le cas de la POI 1.

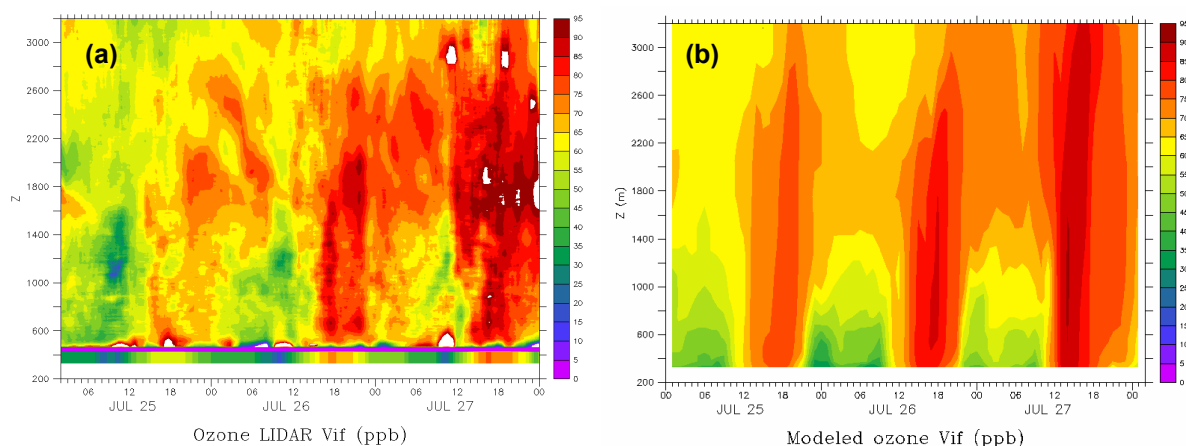


Figure 3-7. Comparaison des résultats pour le O₃ (en ppbV) avec les mesures LIDAR (a) et le forçage MM5/CHIMERE (b)

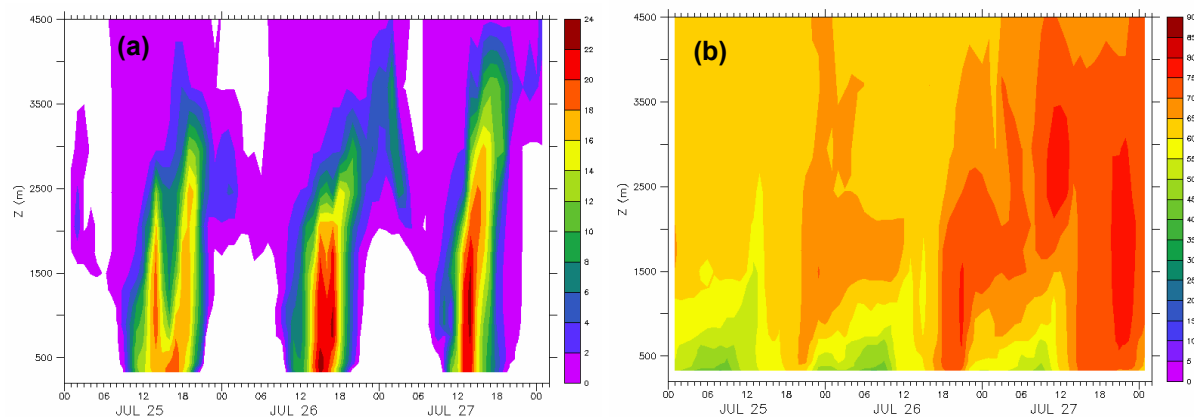


Figure 3-8. Parts en ppbV de l’ozone local (a) et d’origine régional (b) estimées par le modèle au-dessus de Vif

Lors de la matinée du 27 juillet 1999, un apport important d’ozone provenant de l’extérieur du domaine de Grenoble est détecté par le modèle entre 2500 m et 3000 m. Un calcul de rétrotrajectoires de vent sur la figure 3-9 à l’aide du modèle américain HYSPLIT (accessible librement à l’adresse <http://www.arl.noaa.gov>) alimenté par les données du modèle

météorologique NCEP-GFS montre que les masses d'air riches en ozone à 2500 m d'altitude au-dessus de Grenoble avaient transité le jour précédent au-dessus de la région de Marseille et dans la plaine du Pô le 25 juillet à des altitudes caractéristiques de la hauteur de la CLA (2500 m au-dessus de Marseille et 3500 m au-dessus de la plaine du Pô). Ces deux régions sont des régions avec des émissions de précurseurs de l'ozone très importantes et l'ozone observé en altitude le 27 juillet est très certainement de l'ozone transporté depuis ces régions. Cet apport d'ozone en altitude a certainement contribué aux niveaux d'ozone élevés observés le 27 juillet en étant ramené au sol par le mélange vertical qui s'opère dans la vallée.

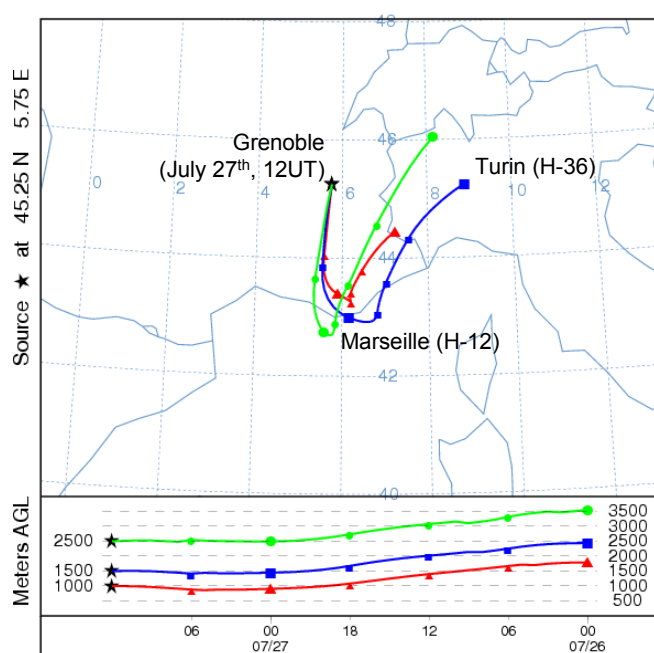


Figure 3-9. Rétrotrajectoires de vent arrivant à Grenoble le 27 juillet à 12 h TU aux altitudes 1000 m, 1500 m et 2500 m (données NOAA/ARL/HYSPLIT)

En ce qui concerne le bilan total de l'ozone produit dans la cuvette, il est très difficile à calculer. Une approche consiste à déterminer un volume autour de la vallée et de calculer un flux d'ozone à travers la surface délimitant de ce volume à l'aide des composantes de la vitesse u , v et w et de la concentration en ozone. Si ce calcul prend bien en compte le transport selon l'horizontale (la diffusion horizontale est négligeable devant le transport), il prend mal en compte la diffusion verticale. Or le mélange vertical est un mécanisme important dans les imports et les exports de l'ozone dans les vallées en été.

Différents volumes utilisés pour le calcul aboutiraient à différents résultats. On verra que dans le cas hivernal de la partie 4.2, avec une convection limitée et un mélange vertical faible, le calcul du bilan de masse pour une espèce gazeuse est plus simple puisqu'il dépend essentiellement du transport.

Episode du 27 juillet 1999 : interaction des régimes locaux et régionaux

La journée du 27 juillet 1999 a été documentée par la POI 1 de GRENOPHOT 1999 [Couach, Balin, Jiménez, Ristori, Perego, Kirchner, Simeonov, Calpini, and van den Bergh, 2003] et a été étudiée dans le cadre de la thèse d'Olivier Couach [Couach, 2002]. Cette journée est caractéristique de niveaux d'ozone élevés ($> 190 \mu\text{g m}^{-3}$) malgré une couverture nuageuse

d'altitude présente dès la mi-journée. La hauteur de la couche de mélange observée par un système radar UHF et le LIDAR de l'EPFL était plus haute que les jours précédents malgré un ensoleillement réduit à cause de la couverture nuageuse. Les calculs d'Olivier Couach n'avaient pas permis à l'époque de déterminer la cause de l'apport d'ozone à haute altitude (autour de 3000 m) mesuré par le système LIDAR lors de l'après-midi du 27 juillet 1999. Un transport à longue distance était l'hypothèse la plus probable. La simulation de cette journée du 27 juillet 1999 a mis en évidence un phénomène tout à fait particulier qui aboutit aux observations citées ci-dessus. Par régime de sud marqué, le vent pénètre sur le plateau du Trièves en s'engouffrant entre les massifs du Dévoluy et du Vercors en étant accéléré par le rétrécissement au niveau du col de la Croix Haute (figure 3-2). Ce vent va entrer en compétition avec le vent de vallée qui se développe au sud de la cuvette grenobloise. Cette compétition entre vent de vallée et vent synoptique va créer des ascendances très fortes au niveau du point de rencontre des deux régimes. Il y a naissance d'un front de vent de vallée. Ce front a été simulé par Metphomod. Afin de vérifier ce résultat, une simulation MM5 à résolution horizontale de 2 km a été réalisée. Les résultats de cette simulation sont comparés à la mesure du profileur de vent sur la figure 2-5 et le front de vent de vallée est également observé sur cette simulation MM5. La localisation et la hauteur de l'ascendance créée par la rencontre des masses d'air sont légèrement différentes selon le modèle mais ce phénomène est représenté de façon très semblable par les deux calculs MM5 et Metphomod. La localisation du front se situe entre le col de la Croix Haute au sud et la basse vallée du Drac au nord. Ces deux limites sont situées à 40 km l'une de l'autre. La localisation du front varie avec l'heure de la journée. La figure 3-10 illustre les différentes masses d'air mises en jeu dans le phénomène. En comparaison la figure 3-11 schématise une situation classique de régime de vent de vallée par conditions anticycloniques.

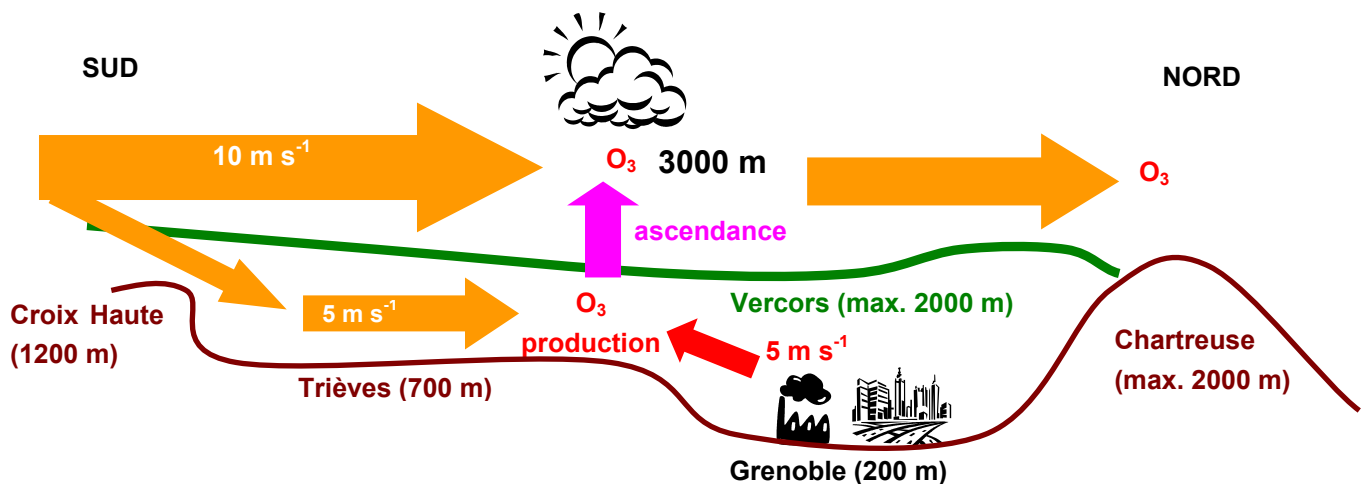


Figure 3-10. Schéma du régime de vent de vallée diurne par fort vent synoptique de S (cas du 27 juillet 1999) selon une coupe sud-nord

Des fronts de vents de vallée ont rarement fait l'objet d'investigation. Ils font intervenir des vitesses de vent faibles ($< 5 \text{ m s}^{-1}$) comparables à celles observées dans les cas de brise de mer

durant l'expérience ESCOMPTE [Puygrenier, Lohou, Campistron, Saïd, Pigeon, Bénech, and Serça, 2004]. Le 27 juillet 1999, le vent de vallée est observé à Vif avec une vitesse de 5 m s^{-1} à 500 m du sol. Le vent synoptique n'est malheureusement pas mesuré au sud de Grenoble mais des vitesses de l'ordre de 5 m s^{-1} sont estimées par le modèle au-dessus du plateau du Trièves. Le front de vent de vallée a joué deux rôles :

- La zone de front de vent de vallée est une zone de vents faibles avec des coefficients de mélange importants dus à la turbulence générée par convection et par la rencontre des masses d'air. La production d'ozone dans cette zone est plus importante que dans l'écoulement en amont. Ce phénomène est observé dans le cas de brise de terre (voir l'expérience ESCOMPTE) lorsque la brise entre en compétition avec un écoulement de direction opposée.
- La zone de front est une zone de convergence. L'ascendance créée par la rencontre des deux masses d'air, d'après les simulations, va transporter l'ozone produit dans la zone de front en altitude (figure 3-10). La masse d'air riche en ozone observée à 3000 m serait due à ce phénomène. Ce phénomène de compétition de masses d'air en région montagneuse induit un mélange vertical beaucoup plus important que celui induit par les phénomènes convectifs.

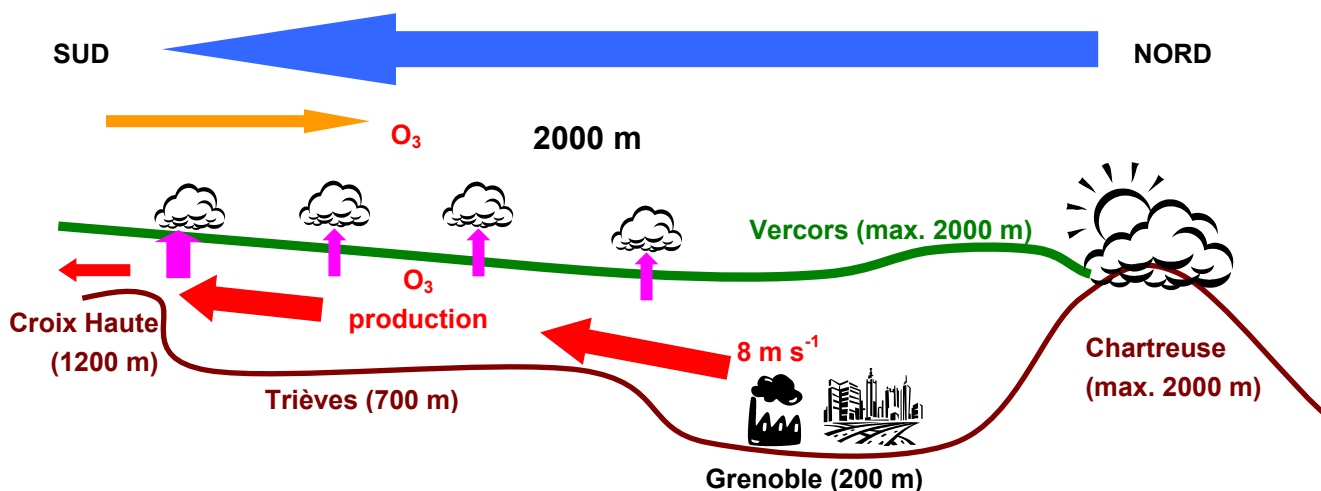


Figure 3-11. Schéma du régime de vent de vallée diurne par vent synoptique de nord-est (cas du 26 juillet 1999) selon une coupe sud-nord

Conclusion sur l'étude de la POI 1 de GRENOPHOT 99

L'étude de la POI 1 de GRENOPHOT a démontré que l'utilisation d'une météorologie et d'une chimie réaliste à l'échelle continentale permettait de mieux caractériser les événements faisant intervenir des apports d'ozone extérieurs aux vallées et à la région Rhône-Alpes. L'utilisation du modèle MM5 employant la technique du *two-way nesting* a permis de faire apparaître la couche de vent de sud située entre 2000 m et 3000 m décrite par [Couach, 2002]

à l'aide des mesures mais jamais modélisée auparavant. Cette couche d'injection s'est révélée jouer un grand rôle dans la photochimie de l'agglomération grenobloise car l'ozone produit dans le panache de l'agglomération durant la journée au sud de l'agglomération au sein du vent de vallée va être injecté dans cette couche. Les processus d'entraînement par lesquels se réalise ce passage restent à être étudiés mais il s'agit certainement de processus semblables à ceux observés en sommet de CLA à l'interface avec la TL (entraînement par convection). Le cisaillement de vent entre la couche de vent de vallée et la couche d'injection doit également jouer un rôle dans cette injection d'ozone dans la couche réservoir. Le passage de l'ozone produit dans le panache vers la couche d'injection a été mis en évidence par l'étude d'un traceur d'ozone régional injecté dans Metphomod.

La simulation de la journée du 27 juillet 1999 a mis en évidence une circulation particulière augmentant la quantité d'ozone produit et générant des hauteurs de mélange supérieures à 3000 m (figure 3-10). La simulation du front de vent de vallée par les modèles MM5 et Metphomod s'accompagne d'ascendances importantes au niveau du front. Un phénomène semblable est observé dans des circulations faisant intervenir une brise de mer et un vent de terre comme il a été observé lors de l'expérience ESCOMPTE en juin 2001. L'utilisation de la chaîne de modèles avec les données ESCOMPTE paraissait alors légitime.

3.2. Validation sur la Période d’Observation Intensive (POI) 2b ESCOMPTE : 23 au 27 juin 2001

“The data set gathered during the ESCOMPTE field phase undoubtedly constitutes a reference against which mesoscale CTMs could be compared in the forthcoming years.”

Cros et al., [2004]

L’expérience ESCOMPTE est à l’heure actuelle, avec l’expérience ESQUIF, la plus importante source de données pour la validation des modèles de chimie transport au niveau français. Contrairement à l’expérience ESQUIF qui consistait en l’étude de la région parisienne, l’expérience ESCOMPTE portait sur une région avec des hétérogénéités de sol très importantes. La région de Marseille comporte un relief assez accidenté formé de collines avec une végétation essentiellement méditerranéenne à l’est. A l’ouest s’ouvre la vallée du Rhône avec une importante activité agricole (figure 3-12).

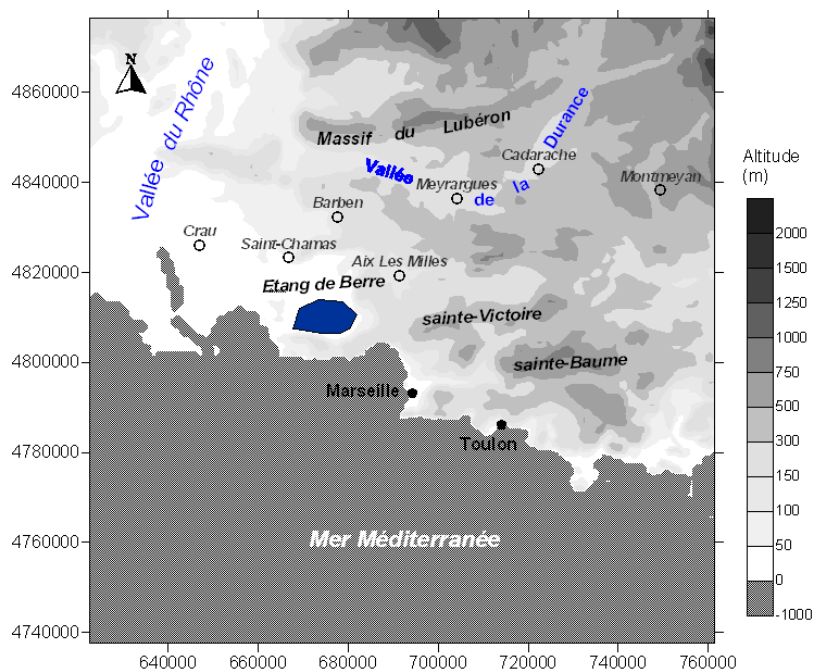


Figure 3-12. Topologie du domaine ESCOMPTE (xmin = 622 km, ymin = 4737 km, dimensions 140 km * 140 km) en coordonnées UTM zone 31

Le programme ESCOMPTE s’est attaché à décrire un domaine de 140 par 140 kilomètres centré sur l’agglomération marseillaise (figure 3-12). Ce domaine est formé par trois zones avec des caractéristiques propres :

1. l’agglomération marseillaise avec ses 1,2 millions d’habitants ;
2. la région de Fos-Berre située autour de l’étang de Berre à 20 km au nord ouest de Marseille et séparée de Marseille par des collines culminant à 300 m. Cette zone est

caractérisée par une forte activité industrielle (raffineries, centrales électriques, ...) et entourée de zones résidentielles avec un fort trafic ;

3. les zones rurales qui sont soit agricoles, soit recouvertes par la végétation méditerranéenne.

A l'échelle synoptique, les Alpes et le Massif Central induisent à l'échelle régionale un fort courant de nord dans la vallée du Rhône : le Mistral. A une échelle plus fine, les Préalpes et les Alpilles qui sont des chaînes de montagnes et de collines parallèles à la côte (Sainte-Baume, Sainte-Victoire, Lubéron, Ventoux) vont canaliser les masses d'air qui prendront une direction ouest-est. Enfin, la mer Méditerranée qui contraste avec des sols calcaires couverts de végétation méditerranéenne basse ou dénudés ainsi que l'ensoleillement important de cette région méridionale conduisent à la formation, en régime anticyclonique, d'un système de brise de mer/brise de terre qui joue un grand rôle dans la distribution spatiale des polluants. L'interaction de ce système de brises avec le régime de vent synoptique et avec le système régional de la vallée du Rhône rend la description de la météorologie de la région par un modèle très délicate [Bastin, Drobinski, Dabas, Delville, Reitebuch, and Werner, 2004]. Le forçage du sol est crucial car il va fixer l'importance relative des différentes échelles : locale, régionale et synoptique. La présence de fortes émissions de précurseurs de l'ozone par les activités humaines mais aussi par les sources biogéniques présentes sur le site vont provoquer d'importants épisodes de smog photochimique lors des mois chauds de l'année [Lasry, Coll, and Buisson, 2004].

La prise en compte des caractéristiques météorologiques conduisant à des épisodes de smog photochimiques a permis d'étudier différents régimes météorologiques lors de cinq périodes d'observations intensives (POI). Il a été décidé de tester la chaîne sur la deuxième POI, la POI 2. La POI 2 a été dissociée en POI 2a et POI 2b par les participants au programme car ces deux périodes présentaient deux régimes météorologiques très différents. Du 20 au 23 juin 2001, un régime de Mistral modéré faiblissant a permis le développement de régimes de brises très localisés (POI 2a). Du 24 au 26 juin 2001, des conditions anticycloniques ont permis le développement d'un régime de brises de mer et de terre sur l'ensemble de la zone ESCOMPTE (POI 2b). Il est particulièrement intéressant de tester la chaîne de modèles sur la POI 2 pour plusieurs raisons :

- l'étude des POI2a et POI2b permettait de traiter de façon continue deux situations météorologiques totalement différentes : une situation de vent modéré de nord-ouest avec peu ou pas de développement d'un régime de brises et un régime de vent faible conduisant au développement d'un régime de brises ;
- les niveaux de pollution par l'ozone étaient importants et les maximums étaient localisés à des endroits différents selon la situation météorologique ;

- l'influence des paramètres de sol du modèle est déterminante dans son aptitude à générer des circulations locales comme les brises ;
- le couplage météorologique entre les échelles synoptique et régionales (MM5) et l'échelle locale (Metphomod) conditionne les contributions relatives des phénomènes dynamiques : Mistral et canalisation à l'échelle régionale et régime de brise à l'échelle locale ;
- la présence d'une intrusion stratosphérique détectée vers 3500 m lors de la POI 2a introduisait la problématique du chapitre 7 de la thèse ;
- enfin la POI 2 a fait l'objet d'un nombre important de publications et la confrontation des résultats de la chaîne de calcul avec les résultats existants était facile.

3.2.1. Paramètres de sols

Des validations du module de sol de Metphomod étaient proposées par Perego [1999] et Schneider et al. [2004]. Afin de valider les paramètres de sol utilisés pour le site d'ESCOMPTE, nous utilisons des jeux de données collectés sur quatre sites. Pour cette validation, nous nous intéressons d'abord au rayonnement incident au sol. Ensuite nous étudierons les échanges d'énergie (flux de chaleur sensible) et de masse (flux de chaleur latente) entre le sol et l'atmosphère. Les sites sont localisés sur la figure 3-12 et leurs caractéristiques sont données dans le tableau 3-2. Les jeux de données sont disponibles dans la base de données ESCOMPTE à l'adresse <http://medias.obs-mip.fr/escomppte>.

Tableau 3-2. Caractéristiques des sites pris en compte dans l'étude du module de sol d'après Michou et al. [2005]

Site	Typologie du site	Alentours	Longitude	Latitude	Altitude (m)	Rugosité (m)	LAI	Canopée (m)
Meyrargues	Champ de maïs	Terrain plat avec cultures	43°39'	5°32'	195 m	0,05 à 0,12	0,8 à 2,8	
Montmeyan	Forêt de <i>Quercus Pubescens</i>		43°39'	6°05'	525 m	0,77	2,3	12
La Barben	Buissons <i>Quercus coccifera</i>		43°35'	5°15'	65 m	0,03		0.5
La Crau	Sol nu calcaire	Plaine sol nu	43°34'	4°49'	10 m	1,54.10 ⁻²		

Principe de la simulation

Afin de valider le fonctionnement du module de sol de Metphomod, on réalise une simulation sur tout le domaine de la figure 3-12 avec une résolution horizontale de 2 km à l'aide de

paramètres de sol utilisés pour Grenoble (voir annexe B.2). La simulation est décrite dans la partie 3.2.2. De cette simulation, on extrait la colonne selon la verticale du modèle où se trouve le site à étudier. Ensuite on réalise des simulations en une dimension selon la verticale en utilisant des conditions aux limites de type *cyclic*. En comparant les résultats du modèle aux mesures disponibles de flux, de température et d’humidité dans le sol et dans l’atmosphère, on détermine ainsi les paramètres de sol pour Metphomod.

Paramètres de sol

Les paramètres de sol vont jouer un grand rôle dans l’amplitude des phénomènes locaux : brises de mer, brises de terre, vents de pente. L’originalité par rapport à la simulation réalisée sur l’Y grenoblois (partie 3.1) est bien évidemment la présence de la mer dans la moitié sud du domaine de simulation de la figure 3-12. L’évolution de la température de l’eau et la description de la hauteur de la CLA du milieu marin, la couche limite marine (CLM), et le continent se sont révélées déterminantes sur les localisations des maximums d’ozone [Menut, Coll, and Lasry, 2005].

Tableau 3-3. Disponibilité des données en fonction de la période d’étude (POI 2 du 20 au 26 juin 2001 et POI 3 du 2 au 4 juillet 2001)

site	période	jeu de données	flux chaleur latente	flux chaleur sensible	flux ozone	flux isoprène
Meyrargues	POI 2	INRA	×	×	×	
	POI 3	INRA				
Montmeyan	POI 2	LA, LCEE	×			×
	POI 3	MF_4M				
La Barben	POI 2	MF_4M	×	×		
	POI 3	LA, LCEE				
La Crau	POI 2	MF_4M	×	×		
	POI 3	MF_4M	×	×		

La température de la mer varie au cours de la campagne ESCOMPTE. Lors de la POI 2, la température de l’eau mesurée à la bouée Météo France côte d’Azur a varié de 20 à 24°C (figure 3-13). Les variations ont deux composantes : les oscillations journalières liées à l’ensoleillement de période 24 heures et la variation liée au réchauffement de l’eau par accumulation d’énergie et sous l’effet des courants marins. Un saut de température de 2°C est observé le 25 juin. Des simulations exploratoires ont montré que si la température de l’eau était fixée constante à 20°C tout au long de la simulation, la CLM ne pouvait pas se développer et les polluants émis en mer restaient dans la première couche du modèle (dans nos simulations 50 m) où ils ne réagissaient pas. Or des poches d’ozone produites en mer à partir des précurseurs émis par l’agglomération marseillaise ont été observées très nettement dans la région de Toulon le 21 juin (POI 2a) comme le montre les cartes de l’AASQA locale

de la figure 3-14. Cela implique un mélange des polluants dans la CLM. Le modèle évalue la hauteur de la CLM à 200 m le 21 juin 2001 à 14 TU.

Tableau 3-4. Paramètres de sol pour les 25 classes de sol de Metphomod (24 classes USGS + 1 classe urbain diffus).

USGS	Description	Rugosité (m)	Albédo sol	Capacité thermique ($10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$)	Diffusivité thermique ($10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	Couvert végétal	Albédo canopée	LAI ($\text{m}^2 \text{ m}^{-2}$)	Résistance stomatale (s m^{-1})
1	Urbain dense	2,0	0,15	1,0	1,0	0,1	0	0	0
2	Champs et pâturages	0,8	0,19	1,0	0,5	0,8	0,25	2	100
6	Champs et forêts	1,2	0,19	1,0	0,5	0,8	0,25	2	100
7	Herbe haute	0,4	0,19	1,0	0,5	0,8	0,25	4	100
8	Herbe et broussailles	0,35	0,25	1,0	0,7	0,5	0,25	2	100
9	Vignobles	0,4	0,23	1,0	0,5	0,8	0,25	2	100
12	Forêt de feuillus	8,0	0,11	1,5	0,7	0,8	0,1	8	100
14	Forêt de conifères	8,0	0,10	1,5	0,7	0,8	0,1	12	200
15	Forêt mixte	3,0	0,12	1,5	0,7	0,8	0,1	10	150
16	Mer	0,01	0,09	4,2	7,5	0	-	-	-
19	Sol nu ou avec peu de végétation	0,2	0,3	0,75	1,4	0,1	0,25	0,5	100
24	Neige et glace	0,001	0,7	4,2	1	0	-	-	-
25	Urbain diffus	1,5	0,15	1,0	0,8	0,3	0,25	4	50

Paramètres de sol pour les étendues d'eau (classe 16 dans le tableau 3-4)

La couche limite marine (CLM) est l'équivalent de la CLA au-dessus des océans. Sa hauteur varie selon la turbulence générée au-dessus de l'eau. En été, sa hauteur est de quelques centaines de mètres aux heures les plus chaudes. Afin de décrire correctement l'évolution des températures de la mer et de l'atmosphère marine, des tests de paramètres de sol ont été effectués. La journée du 25 juin 2001 a été simulée en 1D avec Metphomod. Le forçage aux bords utilisé est le sondage de Nîmes pour le 25 juin à 00 TU. Les données de température de l'eau et de température de l'air représentées sur la figure 3-13 sont issues de la bouée Côte d'Azur située à 7,8°E et 43,4°N. Les paramètres de sol utilisés par Metphomod sont donnés dans le tableau 3-4. La capacité thermique est celle de l'eau soit $4,2 \cdot 10^3 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$ soit $4,2 \cdot 10^6 \text{ J K}^{-1} \text{ m}^{-3}$, par contre la diffusivité thermique est augmentée volontairement pour reproduire le brassage interne à l'océan. A 20°C, la diffusivité thermique de l'eau est de $0,6 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, soit $0,14 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Pour notre application marine, nous prenons cette diffusivité thermique égale à $15 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Cette valeur implique un brassage important de la surface de l'eau qui amortit les variations diurnes de la température de l'eau en surface. Les variations diurnes de la température de l'air au-dessus de l'eau sont ainsi réduites et la couche limite marine (CLM) peut se développer. La journée du 21 juin 2001 témoigne de l'importance de la hauteur de la CLM sur la formation d'ozone en mer. La mise en place de la brise de mer dans la région de

Toulon a ramené des masses d’air riches en ozone sur la côte. Cet ozone a été produit à partir de précurseurs émis dans la région de Berre, emportés en mer par le vent de nord qui dominait à Marseille le matin du 21 juin puis transportés vers la côte varoise au sein de la brise de mer.

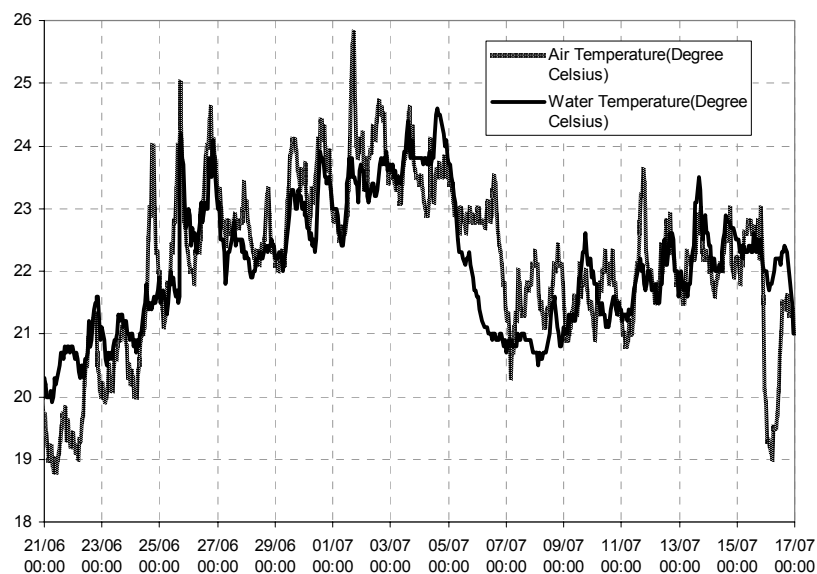


Figure 3-13. Température de l’eau et température de l’air mesurées par la bouée Côte d’Azur (43,4°N 7,8°E) du 20 au 27 juin 2001

Sans le développement d’une CLM, le modèle ne peut pas simuler de production d’ozone au-dessus de la mer car en l’absence de mélange, les polluants gazeux restent piégés dans les premières couches du modèle. Or la journée du 21 juin 2001 présente un champ d’ozone avec des concentrations importantes en bordure de mer à l’est de Marseille. Les précurseurs d’ozone émis dans la région de Fos-Berre et Marseille durant la matinée du 21 juin 2001 ont été transportés en mer par le vent de nord soufflant dans le delta du Rhône. Avec la mise en place d’une brise de mer dans la zone de Toulon, l’ozone produit dans la CLM est ramené au sol. Les cartes de la figure 3-14 témoignent d’une production d’ozone en mer dans la CLM.

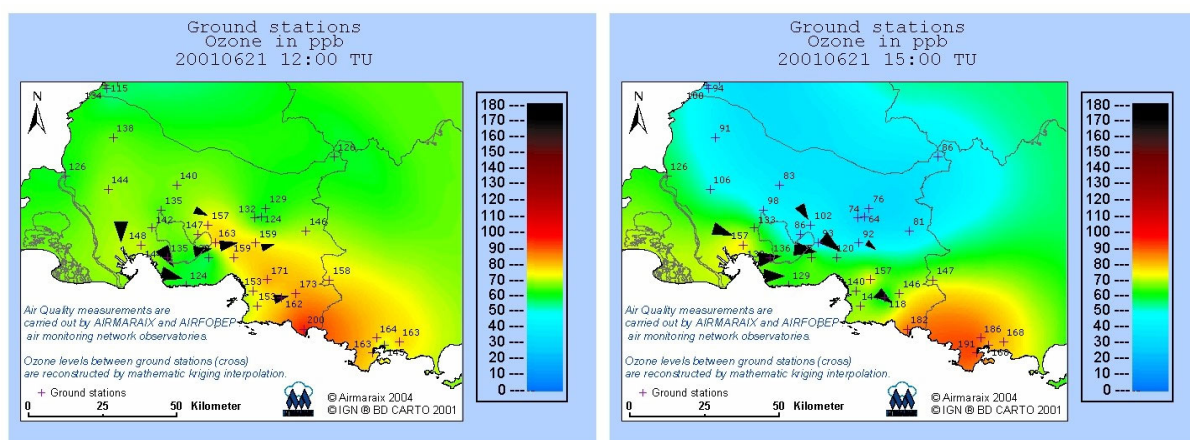


Figure 3-14. Concentrations d’ozone mesurées par le réseau fixe de stations sol le 21 juin 2001 (cartes krigées à partir des observations d’Airmaraix)

Meyrargues : champ de maïs (classe 2 dans le tableau 3-4)

Des mesures de flux d'énergie, de masse et d'ozone ont été réalisées par l'INRA du 12 au 28 juin 2001 (POI 1 et POI 2). Le vent était en moyenne de 7 m s^{-1} avec un épisode de Mistral du 16 au 18 juin où la vitesse était de 3 m s^{-1} . Durant tout le long de la période, l'humidité du sol a peu à peu diminué avant une irrigation du champ qui a eu lieu le 27 juin. Avant le 27 juin, la teneur en eau du sol du sol était de 20 %. Du 1^{er} au 10 juillet, le champ est arrosé à plusieurs reprises et la teneur varie entre 20 % et 30 %. La simulation des températures dans l'air et à la surface du sol montre la difficulté de validation que pose la résolution verticale du modèle la nuit (figure 3-15). Dans le cas du site de Meyrargues, la mesure de température dans l'air semble très influencée par le sol puisque celle mesurée dans le champ de maïs est très proche la nuit de la valeur de la température de la surface du sol simulée par le modèle.

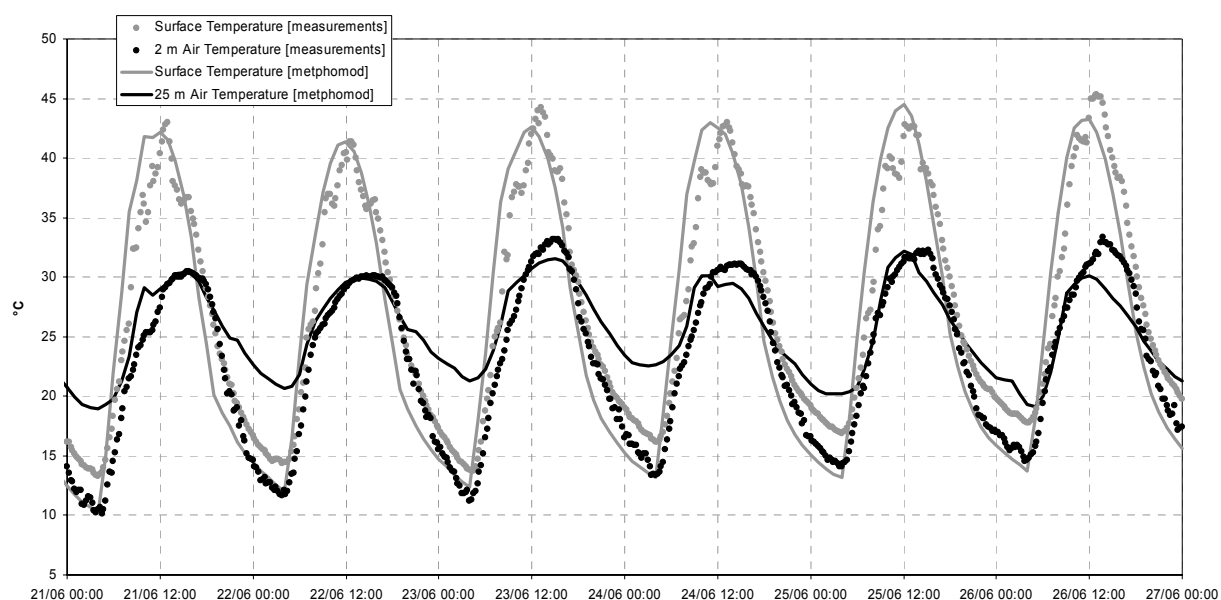


Figure 3-15. Températures mesurées (point) et simulées (lignes) dans l'atmosphère et à la surface du sol sur le site de Meyrargues mesurées du 21 au 27 juin 2001

La Barben : broussailles méditerranéennes (classe 8 dans le tableau 3-4)

Des mesures de flux d'ozone ont été réalisées du 29 juin au 13 juillet par mesures de corrélation turbulente. La tour instrumentée de 8 m de haut était opérée par le Laboratoire d'Aérodynamique (LA). La température maximum durant la journée était 36°C pour des humidités relatives de 40 %. L'expérience de terrain est décrite en détails par Bouchou [2004]. La figure 3-16 montre les résultats des calculs de flux radiatif de Metphomod comparés aux mesures réalisées à la Barben. La radiation globale est légèrement surestimée par Metphomod durant la matinée et est simulée de manière plus correcte dans l'après midi. La radiation nette est légèrement sous-estimée par le modèle. Cela tend à montrer que le sol du modèle possède un

albédo trop fort ou tend à émettre trop d'énergie dans l'IR. L'albédo calculé à partir des mesures varie entre 0,15 et 0,2 alors que l'albédo utilisé pour la simulation est de 0,25. Cette différence d'albédo expliquerait en grande partie la différence entre le modèle et les mesures pour le rayonnement net. La figure 3-17 montre les résultats de Metphomod pour le calcul des flux de chaleur sensible et de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère. Dans Metphomod, ces flux sont calculés entre le sol et un point situé à 10 m au-dessus du sol. Le flux de chaleur sensible est bien reproduit par Metphomod alors que le flux de chaleur latente est légèrement sous-estimé. On remarquera qu'au site de la Barben, le flux de chaleur latente est très inférieur au flux de chaleur sensible. Cela prouve que le sol et la végétation sont très secs et que la majeure partie de l'énergie reçue par le sol sert à échauffer l'atmosphère.

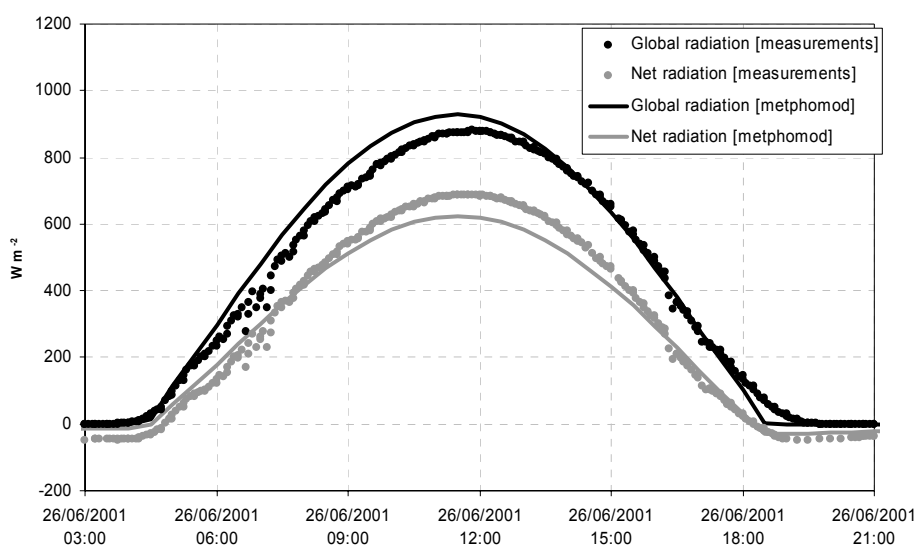


Figure 3-16. Radiations globale et nette mesurées (points) et simulées (courbes) à Barben le 26 juin 2001

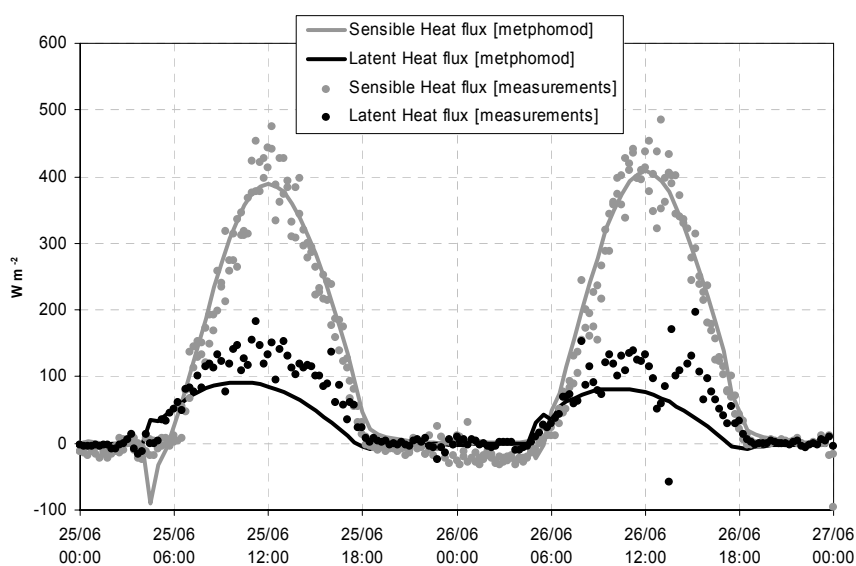


Figure 3-17. Flux de chaleur sensible, flux de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère mesurés (points) et simulés (lignes pleines) à Barben les 25 et 26 juin 2001

La Crau : site à sol nu (classe 19 dans le tableau 3-4)

Le site de La Crau est localisé dans la plaine semi-aride de La Crau qui s'étend sur une superficie de 11 500 ha et qui est formée d'un sol quasiment nu. Les alentours du site forment un sol plat uniforme sur une circonférence de 1 km. Les émissions locales de précurseurs d'ozone sont inexistantes mais le complexe industriel de Fos-Berre est situé 20 km au sud. Des mesures de flux d'ozone ont été réalisées par le LA du 20 avril au 31 mai 2001 à l'aide d'un mât de 8 m identique à celui opéré à la Barben. Des mesures de flux de NO_x ont été réalisées du 15 mai au 7 juin à l'aide de la méthode Relaxed Eddy Accumulation (REA) sur un mât de 6 m. Le site est soumis à deux régimes de vent : un régime de nord nord-ouest avec des vents forts (en moyenne 9 m s⁻¹ avec des rafales à 18 m s⁻¹) qui apporte des masses d'air sèches et un régime de sud-sud-est avec des vents faibles apportant des masses d'air humides. Les conditions météorologiques durant la période d'observations sont décrites par Fotiadi [2003]. Comme à la Barben, les mesures et la simulation de la figure 3-18 montrent que le flux de chaleur sensible est plus important que le flux de chaleur latente. L'absence de végétation et la faible teneur en eau du sol expliquent ces observations. Metphomod surestime le flux de chaleur sensible à ce site. Ceci est sans doute dû aux caractéristiques thermiques du sol qui sont différentes dans la réalité et dans le modèle (capacité calorifique et diffusivité thermique).

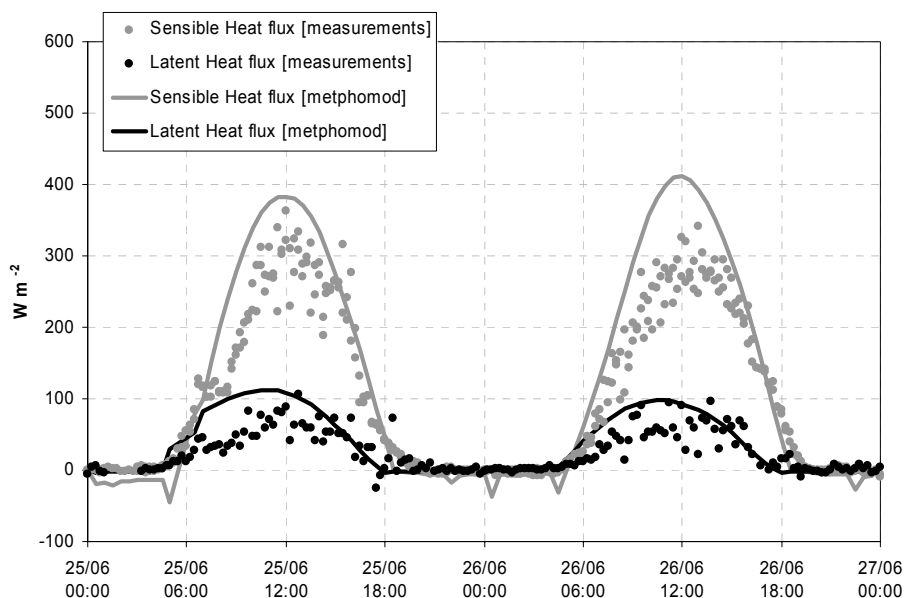


Figure 3-18. Flux de chaleur sensible, flux de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère mesurés (points) et simulés (lignes pleines) à Crau les 25 au 26 juin 2001

Montmeyan : site de forêt méditerranéenne (classe 14 dans le tableau 3-4)

Une tour de 14 m de haut opérée par le Laboratoire d'Aérodynamique (LA) a été installée dans cette forêt de *Quercus Pubescens*. Des mesures de profils d'ozone et de vent furent réalisées du 10 au 26 juin. A ces mesures se rajoutent des mesures de flux de chaleur sensible et de chaleur latente et de profil de température dans le sol. Les données de turbulence étaient échantillonnées à 64 Hz et moyennées sur une demi-heure. La zone était soumise à deux régimes de vent : un vent calme de sud-est et un vent fort de nord-ouest. Les mesures de flux latents et sensibles du site de Montmeyan ont été comparées aux résultats du modèle. Le flux de chaleur latente mesuré sur le site atteint 300 W m^{-2} lors du maximum d'évaporation, de 11 h à 14 h TU, lors de la POI 2b. Cette valeur élevée, comparée aux flux mesurés sur les sites de Crau et de la Barben, montre que la végétation participe à l'évapo-transpiration de manière importante. Sur ce site de forêt, le flux latent est plus important que le flux sensible. Ceci va avoir pour conséquence de ralentir l'élévation de température dans la couche de surface et limiter la déstabilisation de l'atmosphère. Le développement de la CLA sera ralenti par rapport aux deux sites précédents.

3.2.2. Principe de la simulation de la POI 2b à l'aide la chaîne PREVALP

Afin de simuler la POI 2 d'ESCOMPTE, la chaîne de modèles a été modifiée pour s'adapter à l'étude de la zone ESCOMPTE. Le calcul MM5 est réalisé sur deux domaines imbriqués selon la technique du *two-way nesting* : le domaine 1 de la figure 2-4 et un domaine centré sur la région méditerranéenne avec une résolution de 6 km. Un seul calcul CHIMERE à la résolution 18 km (domaine France de la figure 2-6) est réalisé et fournit les concentrations horaires en espèces chimiques aux frontières de la zone ESCOMPTE de la figure 3-12. Le calcul sur la zone ESCOMPTE est réalisé à l'aide du modèle Metphomod avec une résolution horizontale de 2 km. Pour le calcul Metphomod, les émissions d'espèces gazeuses proviennent du cadastre réalisé dans le cadre du projet ESCOMPTE [François, Grondin, Fayet, and Ponche, 2005].

Topologie et occupation des sols

Le calcul Metphomod sur la zone ESCOMPTE de la figure 3-12 utilise une topographie extraite de la base de données GLOBE de USGS/NGCD et l'occupation du sol de la base de données de l'Université du Maryland, USA [Hansen, De Fries, Townshend, and Sohlberg, 1998]. L'occupation des sols utilise la classification USGS selon 24 classes auxquelles on ajoute une classe pour l'urbain diffus (tableau 3-4). Les deux bases de données ont chacune une précision de 1 km^2 .

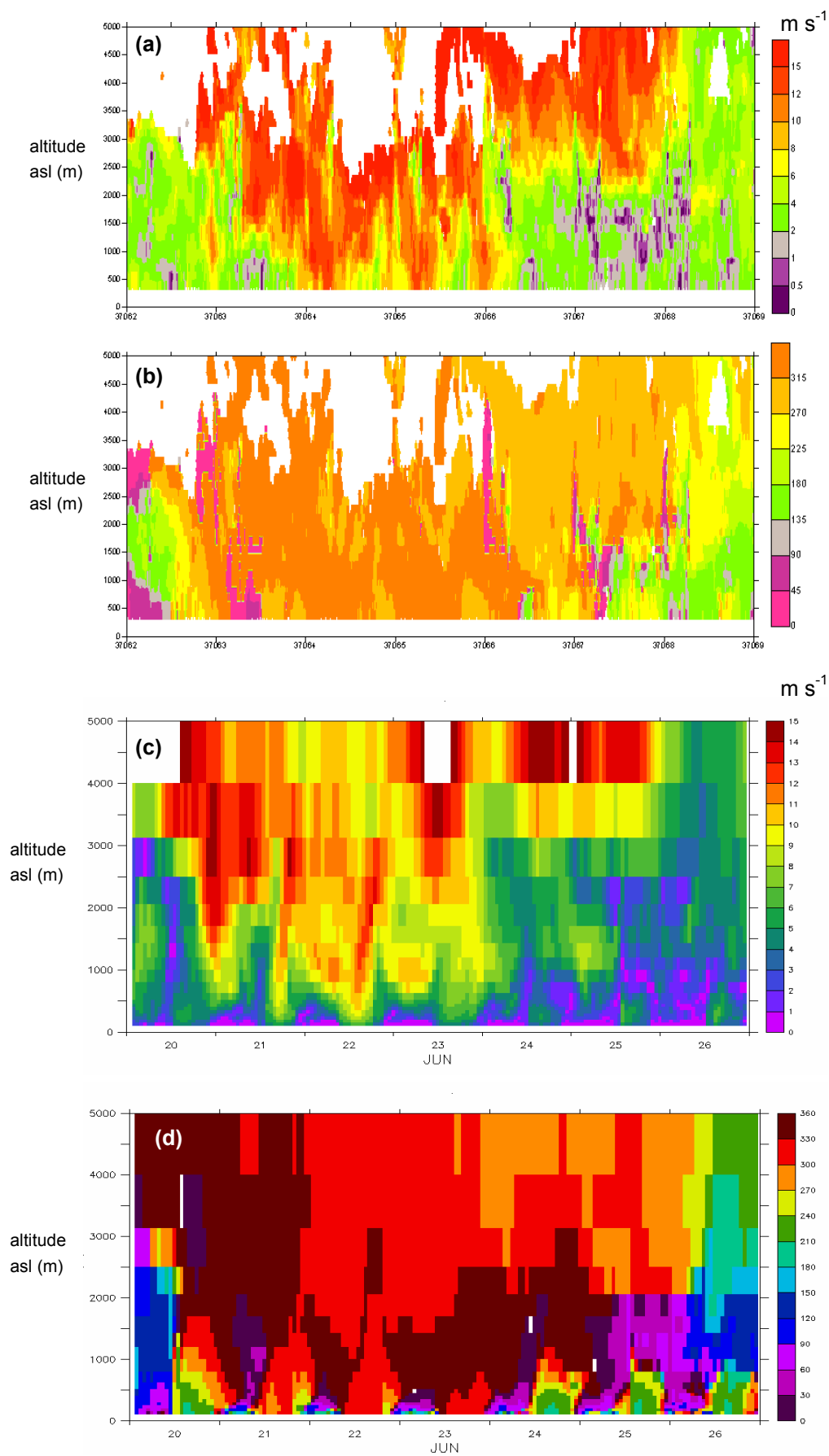


Figure 3-19. Comparaison entre le profileur de vent DEGREANE pour la vitesse du vent (a) et la direction (b) et le modèle Metphomod pour la vitesse (c) et la direction (d) à Aix les Milles

Cadastre des émissions

Le cadastre de la zone créé pour les besoins de la modélisation de la POI 2 est utilisé [François, Grondin, Fayet, and Ponche, 2005]. Ce cadastre a une résolution horizontale de 1 km² et une résolution temporelle horaire. Il fait la distinction entre les sources surfaciques et les sources ponctuelles. Ce cadastre fournit une résolution temporelle horaire des émissions ainsi, le calcul des émissions horaires de la partie 2.5.2 n'est pas réalisé. Il fournit une spéciation des COVNM réels ainsi, le calcul de spéciation décrit dans la partie 2.5.2 n'est pas réalisé et l'agrégation des COVNM réels en espèces RACM réelles est réalisée directement.

Calcul régional MM5 et CHIMERE

Le calcul MM5 est réalisé sur deux domaines imbriqués selon la technique du *two-way nesting* sur deux domaines : le domaine 1 de la figure 2-4 et un domaine centré sur la région méditerranéenne avec une résolution de 6 km. Un seul calcul CHIMERE à la résolution 18 km (domaine France de la figure 2-6) est réalisé et alimente Metphomod.

Calcul Metphomod sur la zone ESCOMPTE

Dans notre simulation, le modèle Metphomod simule la météorologie et la chimie de l'atmosphère sur le domaine de la figure 3-12 avec une résolution horizontale de 2 km et selon 70 mailles dans chaque direction horizontale. Metphomod est alimenté avec les sorties MM5 avec une résolution de 6 km et les sorties de CHIMERE avec une résolution de 18 km.

3.2.3. Validation du calcul dynamique et chimique sur la zone ESCOMPTE

Seul le calcul Metphomod sur la zone ESCOMPTE de la figure 3-12 est validé à l'aide de quelques jeux de données pour la dynamique et la chimie de l'ozone. Ces jeux de données sont disponibles dans la base de données ESCOMPTE à l'adresse <http://medias.obs-mip.fr/escomppte>.

Comparaison du calcul météorologique avec des profileurs vent UHF

Les sorties de Metphomod pour le vent sont comparées aux résultats du profileur de vent UHF opéré par DEGREANE sur le site d'Aix les Milles (localisation sur la figure 3-12). Nous attachons plus d'intérêt au profileur DEGREANE qui est le même que celui utilisé dans le cadre du programme POVA. Les résultats du profileur de vent pour le programme POVA sont analysés par [Dallmayr, 2003] et [Chemel and Chollet, 2006]. Durant la POI 2 de

ESCOMPTE, le profileur de vent distingue bien les deux régimes de vent du 21 au 23 juin (POI 2a) et du 24 au 26 juin (POI 2b). Comme le montre les mesures du profileur des figures 3-19a et 3-19b, la POI 2a est caractérisée par un fort vent de nord-ouest qui empêche le développement d'un régime de brise de mer. La POI 2b est caractérisée par un vent de nord-ouest faiblissant les 24 et 25 juin et qui laisse place à un vent d'ouest le 26 juin. Lors de la POI 2b, le développement d'un régime de brises est observé sur les mesures de la figure 3-19b les 24, 25 et 26 juin. Durant la POI 2a, le modèle fait apparaître le développement d'un vent de sud-est nocturne dans les premiers niveaux au-dessus du sol (figure 3-19d). Ce vent n'est pas détecté par le profileur de vent (figure 3-19d). Durant la POI 2b, le modèle fait apparaître une structure à trois couches : en dessous de 800 m asl un vent d'ouest avec des vitesses de 6 m s^{-1} , un vent de nord-est les 24 et 25 juin et plutôt nord-ouest le 26 juin, de 800 m à 2000 m asl avec des vitesses de 5 m s^{-1} et au-dessus de 2000 m le vent synoptique. Le profileur de vent montre également le développement du régime de brise jusqu'à une altitude de 800 m asl mais la couche entre 800 et 1700 m asl est un couche de vent de sud avec des vitesses très faibles ($< 1 \text{ m s}^{-1}$).

Comparaison du calcul chimique avec des systèmes LIDAR DIAL

Un système LIDAR DIAL était opéré à Aix les Miles par Météo France (localisation sur la figure 3-12). La présence du LIDAR sur le même site que le profileur de vent présente l'intérêt de pouvoir corréler les différentes couches de vent avec les concentrations en ozone comme dans le cas de Grenoble [Couach, Balin, Jiménez, Ristori, Perego, Kirchner, Simeonov, Calpini, and van den Bergh, 2003].

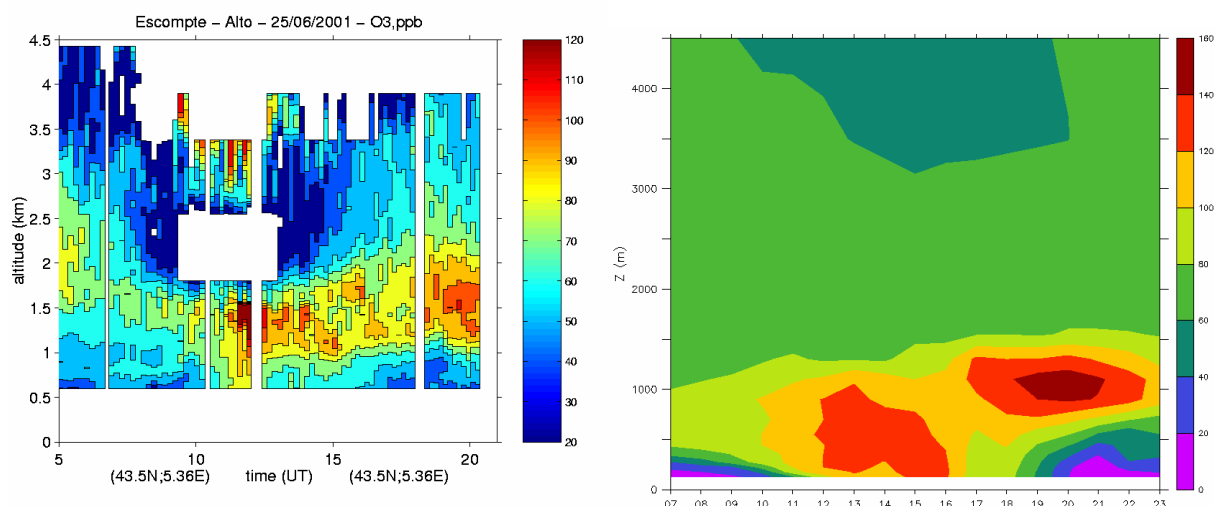


Figure 3-20. Comparaison de l'ozone en ppbV mesuré par le LIDAR DIAL d'Aix les Miles (gauche) avec l'ozone simulé par Metphomod (droite) le 25 juin 2001 de 5 h à 21 h TU

La comparaison de la mesure LIDAR du 25 juin 2001 avec le résultat de Metphomod de la figure 3-20 montre que le mélange s'effectue dès 12 h HL. De fortes concentrations d'ozone

sont mesurées en-dessous de 1500 m asl de 13 h à 15 h HL dans la zone de vents calmes décrite à l'aide des résultats du profileur de vent. Avec la mise en place de la brise de mer, de l'air pauvre en ozone arrive en dessous de 1 km asl. Le modèle décrit parfaitement ces deux phénomènes. Le stockage de l'ozone entre 1000 et 2000 m asl à partir de 17 h HL est également reproduit par le modèle mais les hauteurs des différentes couches sont légèrement sous-estimées. On remarque que les concentrations d'ozone dans la troposphère libre dans nos simulations sont trop fortes (autour de 60 ppbV en moyenne contre des mesures de 40 ppbV).

Comparaison du calcul chimique avec quelques stations sol

Après la comparaison des résultats du calcul avec les données en trois dimensions, les résultats du modèle ont été comparés aux mesures réalisées à quelques sites mesurant l'ozone au sol. Pour notre calcul, il était intéressant de savoir si Metphomod simulait correctement la présence d'un front de brise de mer et si l'impact sur la photochimie était bien reproduit. Les variations de la concentration d'ozone au site de Cadarache dans la vallée de la Durance (localisation sur la figure 3-12) montrent l'impact de la présence du front sur la production d'ozone les 25 et 26 juin 2001. Les concentrations d'ozone mesurées à Cadarache durant la POI 2 sont comparées aux résultats de Metphomod sur la figure 3-21. Lors de la POI 2a (20 au 23 juin 2001), le modèle tend à surestimer les maximums journaliers. Les pics d'ozone de la POI2b (24 au 26 juin 2001) sont relativement bien détectés, preuve que Metphomod génère correctement un front de brise. Les maximums d'ozone mesurés à Cadarache les 25 et 26 juin 2001 dépassent le seuil d'information de $180 \mu\text{g m}^{-3}$ sur une heure. Les concentrations horaires mesurées atteignent $238 \mu\text{g m}^{-3}$ le 25 juin et $217 \mu\text{g m}^{-3}$ le 26 juin. Le modèle a sous-estimé le pic du 25 juin ($212 \mu\text{g m}^{-3}$) et surestimé celui du 26 juin ($240 \mu\text{g m}^{-3}$).

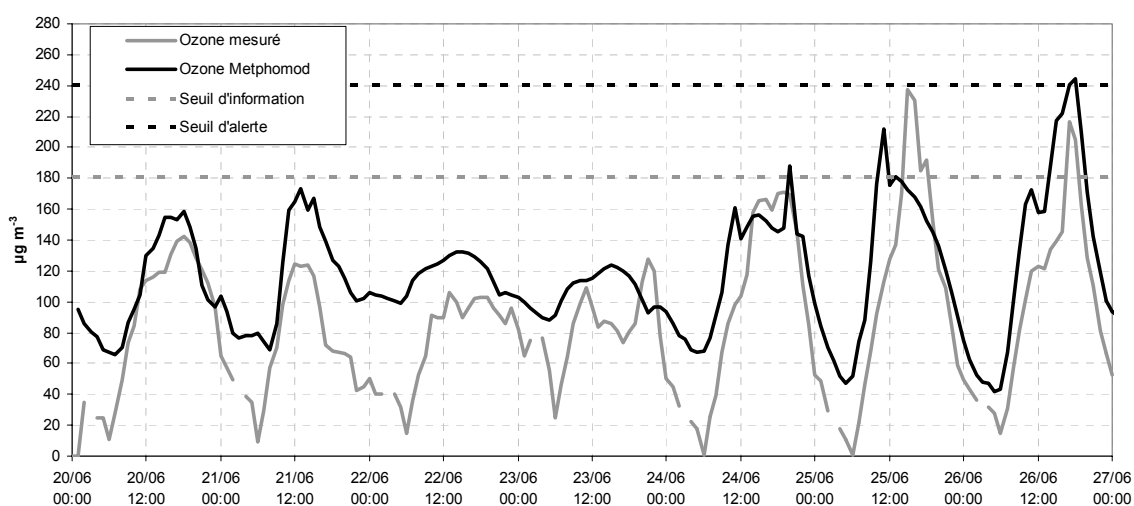


Figure 3-21. Comparaison de l'ozone mesuré à Cadarache (vallée de la Durance) avec l'ozone simulé par le modèle Metphomod du 20 au 26 juin 2001

La figure 3-22 présente une carte des concentrations en ozone simulées par le modèle à 15 h TU les 25 et 26 juin 2001. Les mesures aux stations fixes sont représentées par les points sur la figure 3-22.

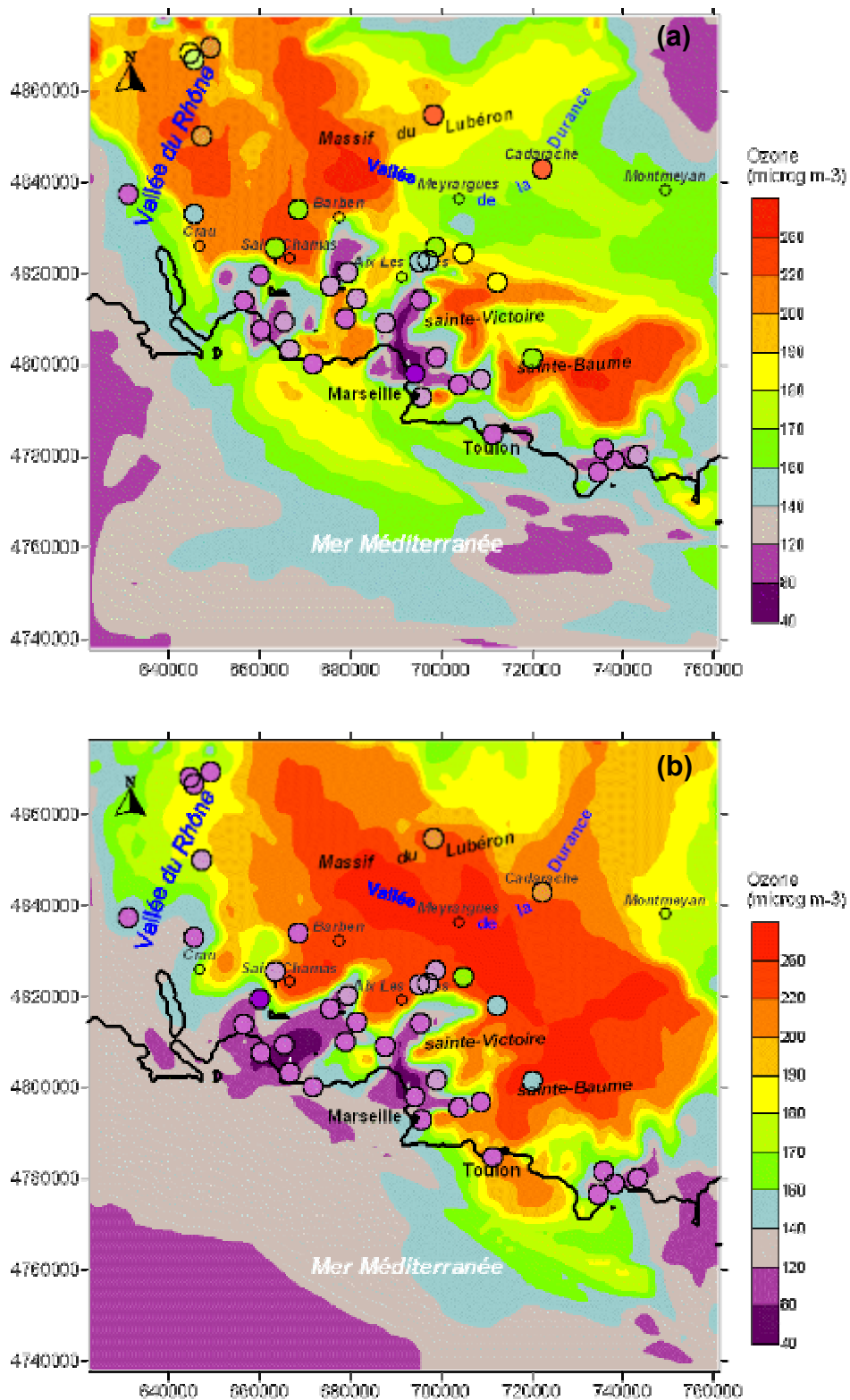


Figure 3-22. Cartes de l’ozone simulé au sol le 25 juin 2001 à 15 h TU (a) et le 26 juin à 15 h TU (b) et mesuré aux mêmes dates aux stations fixes (points)

La comparaison de la figure 3-22 montre la présence d'un panache d'ozone à distance de la côte (ligne noire sur la figure). Le 25 juin, ce panache est observé par les stations de Cadarache et du Lubéron au nord du domaine avec des concentrations supérieures à $220 \mu\text{g m}^{-3}$ et par des stations au nord-ouest du domaine avec des concentrations supérieures à $200 \mu\text{g m}^{-3}$ (figure 3-22a). Le 26 juin, seules les stations de Cadarache et du Lubéron observent des concentrations en ozone supérieures à $200 \mu\text{g m}^{-3}$ (figure 3-22b). Sur la figure 3-22b on remarque que l'ozone s'échappe du domaine par la vallée de la Durance. En bordure de mer, les concentrations restent faibles sous l'effet de la brise de mer qui apporte de l'air pauvre en ozone dans les régions côtières. Ce phénomène est bien vu par le modèle pour les deux journées du 25 et 26 juin 2001.

3.2.4. Conclusion sur la simulation de la POI 2 de ESCOMPTE

Ces comparaisons modèle/mesures ont montré que la chaîne de modèles PREVALP était assez facilement transposable sur un autre site. Les paramètres déterminant d'un site à l'autre sont les paramètres de sol et de végétation. Les simulations ont montré que les variations diurnes de la température en région méditerranéenne étaient plus importantes qu'en région alpine à cause de sols très secs et souvent dépourvus de végétation. Les étendues d'eau doivent être prises en compte de manière la plus précise possible et notamment la variation de leur température d'un jour à l'autre. Les gradients de températures horizontaux entre la mer et la terre vont déterminer les caractéristiques de la brise de mer (hauteur, longueur de pénétration). Une bonne description dans le temps et l'espace des températures du sol conditionne la qualité de la simulation. Les modèles régionaux type MM5 possèdent des paramètres de sol (capacité thermique, couvert végétal, paramètres de la végétation) qui sont tabulés et qui ne sont pas forcément représentatifs d'une région. Un test scrupuleux de ces paramètres est nécessaire pour décrire correctement les variations de températures dans la couche de surface et la hauteur de la CLA. Les données des profileurs de vent, des LIDAR, des sondages par ballon-sonde et les mesures aéroportées sont des outils précieux pour s'assurer de la bonne description des structures de la CLA par le modèle.

3.3. Analogies entre le site grenoblois et la zone ESCOMPTE

Les phénomènes météorologiques observés durant ESCOMPTE sont très semblables à ceux observés dans la région grenobloise. Les vents thermiques locaux dominant la dynamique de l'atmosphère dans les basses couches et une stratification est observée lors du développement des régimes de brises profondes et peu profondes. La figure 3-23 montre que le front de brise induit un mélange vertical très semblable à celui décrit pour Grenoble dans la partie 3.1. Lors des journées où le vent soufflant dans la vallée du Rhône est de nord, on observe sur la figure 3-23a la création d'une convergence de masses d'air au niveau du front de brise. La brise de

mer qui est un vent soufflant vers le nord dans les premiers 600 m au-dessus du sol rencontre le vent régional soufflant vers le sud dans la vallée du Rhône. Le point de rencontre de ces masses d'air est une zone avec des vents faibles et où le mélange est important. Une ascendance est observée à ce point de rencontre. De l'ozone produit dans la zone du front de brise est transporté en altitude autour de 1000 m. Ce mécanisme de mélange vertical donne alors lieu à des recirculations de l'ozone produit dans la zone de front dans une couche piégée (couche d'injection) entre la brise de mer et le vent régional (figure 3-23a). Cette circulation à trois couches est semblable à la circulation du 27 juillet 1999 décrite pour Grenoble dans la partie 3.1. Elle conduit à la formation de couches réservoir d'ozone visibles au-dessus de la mer sur la figure 3-23a.

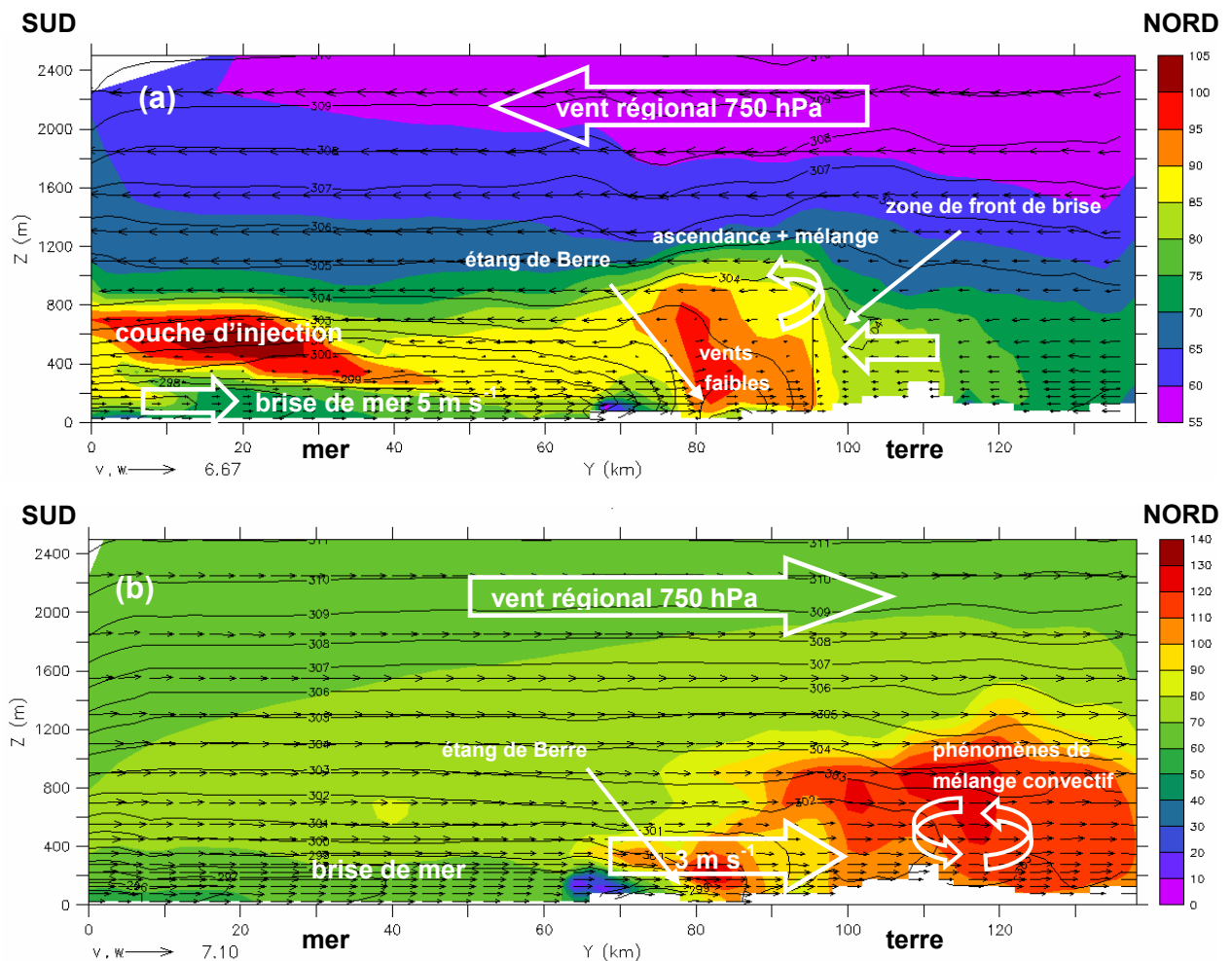


Figure 3-23. Ozone en ppbV dans une coupe verticale orientée sud-nord passant par l'étang de Berre avec les vecteurs vents (v, w) et les contours de θ_{virt} le 24 juin à 16 h HL (a) et le 26 juin à 16 h HL (b)

Lorsque le vent dans la vallée du Rhône est faible, la brise de mer peut se développer librement. On se trouve alors dans un cas de CLC libre. C'est le cas du 26 juin 2001 présenté sur la figure 3-23b. La brise de mer transporte les polluants émis dans la zone de l'étang de Berre vers le nord. Dans ce cas de CLC libre, le mélange vertical est plus important et de

l’ozone est produit dans la CLC au-dessus de la terre à partir des précurseurs contenus dans la brise de mer (figure 3-23b). Les deux mécanismes présentés sur la figure 3-23 sont à comparer avec les circulations de la figure 3-10 et de la figure 3-11. Cette comparaison permet de faire un parallèle entre la journée du 27 juillet 1999 (Grenoble) et la journée du 24 juin 2001 (Marseille) et un parallèle entre la journée du 26 juillet 1999 (Grenoble) et la journée du 26 juin 2001 (Marseille). Si les phénomènes sont très semblables, le mélange vertical induit dans les vallées alpines par les vents locaux est plus important que le mélange induit par la brise de mer. La figure 3-24 montre une comparaison des valeurs de TKE calculées par le modèle le 27 juillet 1999 à 15 h HL dans la région grenobloise et le 24 juin 2001 à 15 h HL dans la région de l’étang de Berre. Pour ces deux journées particulières, les valeurs de TKE mises en jeu dans le front de vent de vallée dans la région de Grenoble sont 5 fois plus importantes que les valeurs de TKE mises en jeu dans le front de brise dans la région de l’étang de Berre. La présence de reliefs dans la région de Grenoble tend à augmenter la production de TKE puisque les masses d’air se retrouvent confinées latéralement au sein des vallées, le mélange vertical induit par ce phénomène est alors accentué.

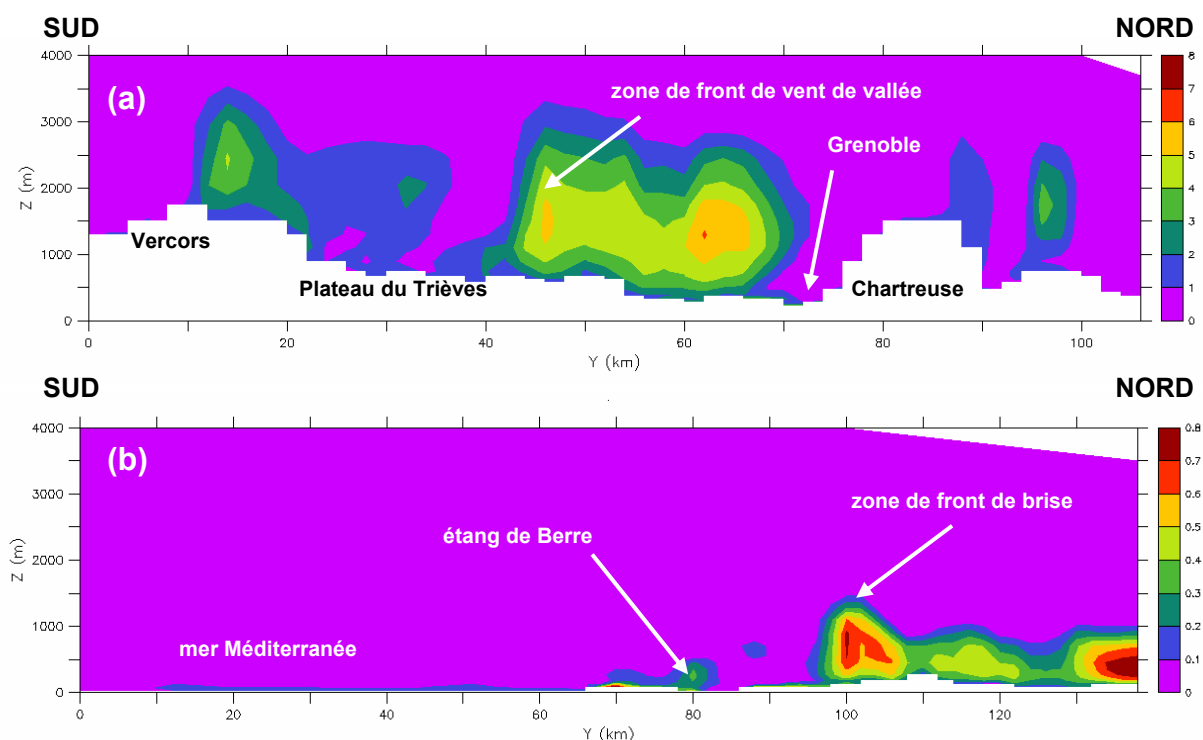


Figure 3-24. Energie cinétique turbulente (TKE) en Pa m^{-3} dans une coupe verticale sud-nord passant par Grenoble le 27 juillet 1999 à 15 h HL (a) et dans une coupe verticale sud-nord passant par l’étang de Berre le 24 juin 2001 à 15 h HL (b)

Cette étude de modélisation a montré que les résultats obtenus sur ESCOMPTE étaient transposables à d’autres régions à relief complexe, notamment aux régions alpines. La base de données d’ESCOMPTE se révèle être très utile pour la validation des modèles de dynamique et de chimie-transport dédiés au terrain alpin.



Chapitre 4. Simulations de qualité de l'air sur la région de Grenoble en été 2003 et février 2005

Dans le passé, la modélisation eulérienne appliquée à la cuvette grenobloise s'est limitée à l'étude d'une journée [Machado Da Silva, 1998] ou d'un épisode de quelques jours [Couach, 2002]. Les calculs étaient souvent limités par les ressources en calcul et les entrées (principalement la météorologie et les émissions) n'étaient disponibles que sur des périodes de quelques jours. Le développement de PREVALP a permis de disposer d'un outil de recherche dont les entrées sont disponibles librement et couvrent des périodes de temps plus longues. Les entrées météorologiques du centre européen ECMWF sont disponibles sur n'importe quelle période de ces 10 dernières années. L'utilisation de MM5 et de CHIMERE permet d'obtenir des conditions de bords pour des modèles régionaux météorologiques et de chimie transport à partir des données ECMWF. Le calcul des émissions par le module CADASTRE permet d'avoir accès à une simulation des émissions pour n'importe quelle période de l'année et pas seulement sur une POI. Le système de modélisation est entièrement déterministe et ne requiert aucune entrée provenant d'expérience de terrain. De plus, le travail réalisé sur la version opérationnelle de la chaîne a permis d'automatiser certains calculs. Dans sa configuration actuelle, le faible besoin de PREVALP en ressources en calcul permet ainsi de simuler des périodes de plusieurs mois en très peu de temps.

Disposant d'un tel outil, il était possible d'explorer d'autres périodes que des POI. Très souvent les dates des POI sont plus motivées par le calendrier et les financements que par des événements exceptionnels. Ces dernières années, une période a retenu l'attention des modélisateurs dans le domaine de la météorologie et de la qualité de l'air. Il s'agit de la canicule d'août 2003. Cet épisode de 14 jours avec de fortes températures a causé de nombreuses morts chez les personnes âgées et sensibles à la chaleur et a conduit à des niveaux de pollution par l'ozone dans la durée jamais observés lors de ces 15 dernières années. Le nombre de morts supplémentaires en France dues à la chaleur a été évalué à 15000 par l'INSERM. Aucun lien entre cette surmortalité et la pollution de l'air n'a encore clairement été établi. D'un point de vue météorologique, les températures nocturnes élevées, un sol très sec et une végétation desséchée ont conduit à des hauteurs de CLC très importantes. Comment ce mélange a-t-il modifié les mécanismes décrits dans le chapitre 3 ?

Les simulations de la qualité de l'air en période hivernale sont très rares. Les modèles dynamiques eulériens utilisés pour la modélisation posent des problèmes d'utilisation en régimes très stables et stratifiés. Les polluants qui posent problème l'hiver ne sont plus l'ozone mais les oxydes d'azote, le benzène et les particules. Même si les modèles CHIMERE et Metphomod ont été développés pour traiter des cas estivaux de pollution à l'ozone, leur emploi dans un cas hivernal n'est pas exclu. Une campagne régionale de cartographie du NO₂ et du benzène à l'aide de tubes à diffusion passive a eu lieu du 1^{er} au 15 février 2005. Cette campagne a montré que les concentrations moyennes en NO₂ et en benzène étaient fortes dans certaines vallées en comparaison de celles des grands centres urbains de la région. Cet épisode

de février 2005 est caractéristique d'un épisode d'inversion thermique qui persiste plusieurs jours dans les vallées. La compréhension des mécanismes gouvernant le mélange et le transport des polluants lors de ces périodes stables est préalable à la réalisation de futures études sur des polluants comme les particules en suspension (PM_{10} et $PM_{2,5}$) dans les vallées.

Nous présentons dans ce chapitre la modélisation de deux périodes à l'aide de la chaîne PREVALP. Ces périodes sont la canicule d'août 2003 (1^{er} au 15 août 2003) et la période du 1^{er} au 15 février 2005. En période estivale, nous nous focaliserons sur l'ozone alors qu'en période hivernale nous nous intéresserons au NO_2 et au benzène. Une approche simplifiée de la modélisation des particules en suspension PM_{10} est également proposée dans le cas hivernal.

4.1. Photochimie de l'atmosphère de la cuvette grenobloise lors de la canicule de 2003

« Toute la France s'est trouvée concernée par des niveaux de pollution exceptionnels, puisque seules les régions montagneuses (Alpes, Pyrénées) sont relativement épargnées par les fortes concentrations » déclarait le MEDD dans un communiqué de presse du 2 septembre 2003.

L'épisode de canicule d'août 2003 reste un événement météorologique marquant de ces dernières années, au même titre que la tempête de décembre 1999. Le phénomène a touché l'Europe entière et a causé une mortalité accrue des personnes sensibles. Si les températures élevées ont été pointées comme la cause principale de ces nombreux décès, la pollution par l'ozone et les particules pourraient avoir aggravé le bilan humain. C'est ce que tend à montrer des études récentes [Fischer, Brunekreef, and Lebret, 2004; Stedman, 2004].

Dans son communiqué du 3 septembre 2003, le MEDD oubliait les vallées alpines qui avaient pourtant bel et bien connu des niveaux de pollution par l'ozone élevés. Ce constat basé sur des résultats de modèles ne prenant pas en compte le relief complexe traduit bien l'importance de décrire finement les régions montagneuses dans les calculs météorologiques et photochimiques. Afin de limiter dans l'avenir de tels événements pollués, des réductions d'émissions à long terme sont préconisées. Des études de modélisation ont montré que seules des réductions d'émissions sur le territoire français et européen pourraient amener à une baisse significative des niveaux d'ozone [Vautard, Honoré, Beekmann, and Rouil, 2005]. Cette étude a également montré que si le nord de la France avait été fortement touché par la pollution transfrontalière, le sud est de la France (et surtout les régions Rhône-Alpes et PACA) était touché par une pollution plus locale. Dans ce contexte, il est intéressant de

connaître quelle est la part d'ozone produit par une région, comparativement avec la part qui est importée de l'extérieur. La chaîne de calcul a donc été utilisée pour simuler la canicule de l'été 2003. Dans un premier temps, un calcul réaliste de la période permet de montrer au niveau local quels sont les phénomènes qui ont abouti aux niveaux d'ozone élevés. Ce calcul permet également de séparer la part d'ozone produite localement de la part importée dans la région. La période de canicule a servi de cas test pour connaître l'impact de nombreuses réductions d'émissions à l'échelle de la région Rhône-Alpes ou à l'échelle de l'agglomération grenobloise dans le cadre du Plan de Protection de l'Atmosphère de Grenoble (PPA). Cette application réglementaire de la chaîne PREVALP est décrite dans l'annexe C.

4.1.1. L'été 2003 : l'été de la canicule

L'été 2003 a été le plus chaud des 50 dernières années. Météo France affirme dans un rapport que cet été s'est surtout distingué par des températures minimales beaucoup plus chaudes que celles du second été le plus chaud, celui de 1994. En France, à partir du 4 août, 2/3 des stations météorologiques du territoire observaient des températures dépassant 35°C alors que 15 % observaient des températures supérieures à 40°C. Des records absolus de températures maximales ont été battus durant les 12 premiers jours d'août sur 70 stations parmi les 180 stations représentatives des villes françaises. Les températures nocturnes ont été particulièrement élevées les 11 et 12 août. La persistance d'une situation anticyclonique sur l'Europe de l'ouest a bloqué les perturbations orageuses arrivant de l'ouest et a apporté de l'air chaud et sec en provenance du Sud de la Méditerranée à la fois près du sol et en altitude.

Les niveaux d'ozone ont été eux aussi exceptionnels. Selon l'ADEME, plus de 2700 heures du dépassement du seuil 180 $\mu\text{g m}^{-3}$ ont été observées sur 367 stations de mesures (soit 86 % du parc français). Depuis 1991, date de la généralisation des mesures automatiques d'ozone, un événement d'une telle étendue géographique et de durée n'avait pas été observé. A titre de comparaison, l'année 2001, qui était considérée comme l'une des plus polluées depuis 1991, avait connu 1127 dépassements sur 211 sites soit 56 % des sites de l'époque. Les températures diurnes élevées associées à des vents faibles et un ciel dégagé ont contribué à une importante activité photochimique. De nombreux composés secondaires se sont formés durant cette période, notamment des particules fines. Toujours selon l'ADEME, 30 % de la population française a été exposée au moins une fois à un dépassement horaire du seuil d'information pour l'ozone (180 $\mu\text{g m}^{-3}$).

La figure 4-1 fait apparaître les concentrations moyennes hebdomadaires au site alpin du Casset situé dans le massif de l'Oisans. Aucune tendance n'avait été observée durant les étés 2000 et 2001, pourtant qualifiés de « très pollués » par les AASQA et l'ADEME. Durant l'été

2003, les concentrations moyennes hebdomadaires ont suivi une tendance à l'augmentation tout au long de l'été. Cette tendance s'explique par des conditions anticycloniques très marquées durant des périodes de plusieurs jours. Sur les mesures, on voit clairement apparaître quatre périodes durant lesquelles les concentrations d'ozone étaient fortes comparées à la courbe de tendance estivale. Le mois de septembre 2003 (absent sur la figure 4-1) a connu également un épisode de pollution par l'ozone de plusieurs jours.

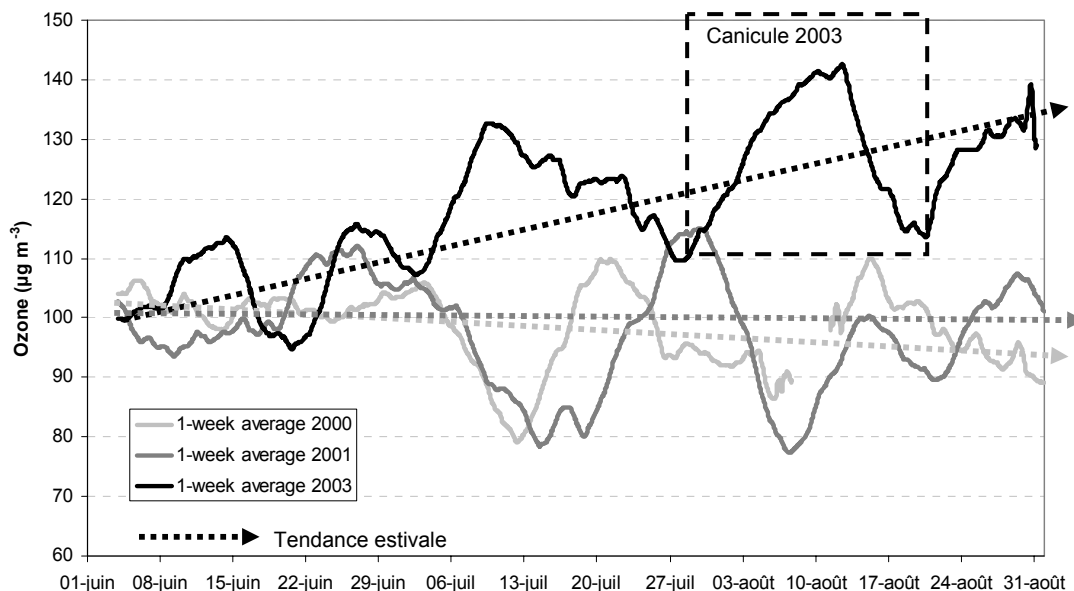


Figure 4-1. Moyenne glissante hebdomadaire de la concentration en ozone mesurée au Casset durant les été 2000, 2001 et 2003 (ligne pleine) et tendance estivale (ligne pointillée)

Mélange à grande échelle

L'étude des radiosondages de Payerne équipés d'une sonde ozone de type ECC (*Electrochemical Concentration Cell*) permet d'avoir un aperçu du mélange vertical moyen se réalisant sur le nord des Alpes. La concentration d'ozone et l'humidité relative sont de bons marqueurs de la couche de mélange puisque pendant la journée, l'ozone et l'humidité sont concentrés dans la couche limite convective (CLC). Ainsi on peut déterminer la hauteur de mélange en détectant sur la figure 4-2 à quelle altitude en partant du sol l'ozone et l'humidité diminuent. On remarquera que les concentrations en ozone restent parfois élevées jusqu'à une certaine altitude (environ 500 m) alors que l'humidité chute. L'incertitude sur la détermination de la hauteur de CLC correspond à cette valeur d'altitude. Le tableau 4-1 fournit une estimation de la hauteur de mélange basée sur les profils d'humidité, d'ozone (figure 4-2) et de température (figure 1-7). Le 11 août, la détermination est difficile car l'humidité et l'ozone entre 1500 m et 4500 m sont faibles alors que la concentration d'ozone à 4700 m dépasse 90 ppbV. Avec cette méthode de détection de la hauteur de la CLC, les hauteurs augmentent du 1^{er} au 13 août pour passer de 1900 m le 1^{er} août à 3500 m le 13 août.

Tableau 4-1. Données à 500 hPa des sondages de Payerne mesurant l'ozone par sonde ECC (données WOUDC)

Radiosondage	Température (°C)	Direction du vent (degrés)		Hauteur du géopotentiel (m)	Estimation de la hauteur de la CLC (m)
20030801.2Z	-8.13	19	NNE	5847	1900
20030804.2Z	-8.71	177	S	5946	2000
20030806.2Z	-11.12	5	N	5925	3000
20030808.2Z	-11	1	N	5887	3500
20030811.2Z	-9.11	313	NW	5901	?
20030813.2Z	-10.15	266	W	5923	3500
20030815.2Z	-14.11	266	W	5792	1700

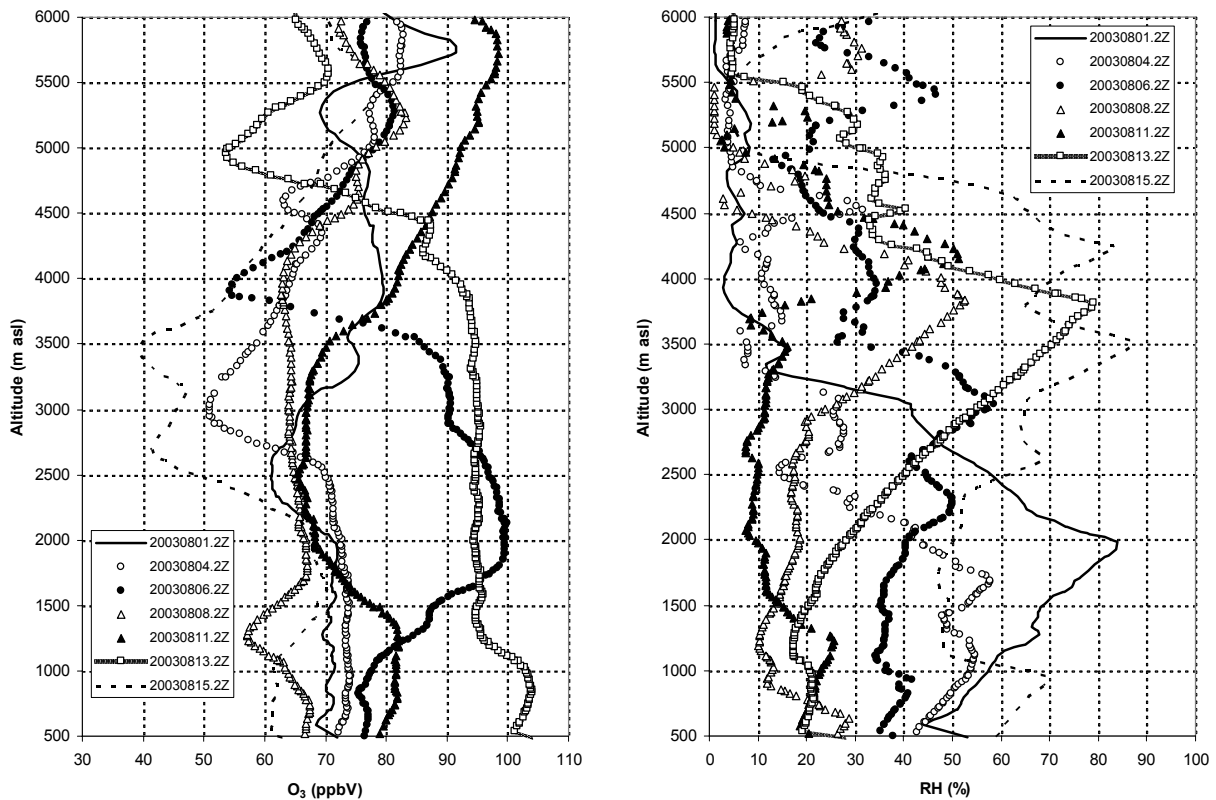


Figure 4-2. Sondages de Payerne pour l'humidité et l'ozone mesuré par sonde ECC (données WOUDC)

4.1.2. Une modélisation spécifique de la période de canicule

La chaîne de modèles est utilisée avec la configuration décrite dans le chapitre 2. Avant de traiter de la période de canicule, le calcul chimique a été réalisé sur la totalité de l'été 2003 et validé à l'aide des données disponibles. Ce premier calcul a fait apparaître que la période de canicule était différente du reste de l'été 2003 par l'humidité du sol et de la végétation. Après un début d'été très chaud, les sols étaient très secs et la végétation a beaucoup souffert

puisque des espèces comme le buis ont été très touchées par la sécheresse. Le dessèchement de la végétation a occasionné le départ de nombreux incendies dans le sud de la région Rhône-Alpes. La période de canicule est une période très particulière qui a nécessité d'adapter la chaîne de calcul.

4.1.3. Calcul régional de la météorologie et de la chimie MM5 et CHIMERE

Le calcul MM5 à résolution 18 et 6 km a été réalisé sur l'intégralité de l'été 2003 par périodes de 15 ou 16 jours, du 1^{er} au 16 et du 16 au 1^{er} du mois suivant pour des raisons techniques. La comparaison des résultats pour la température calculée à 2 mètres par MM5 fait apparaître que MM5 a eu tendance sur l'ensemble de l'été à sous-estimer les températures maximales à de nombreux sites de vallées (figure 4-3). Ceci est du notamment à des effets de maillage. De nombreux sites sont mal décrits par le maillage du modèle. Les conditions stagnantes dans les vallées alpines sont également moins bien décrites par un modèle à maille de 6 km qui ne « voit » pas certaines vallées.

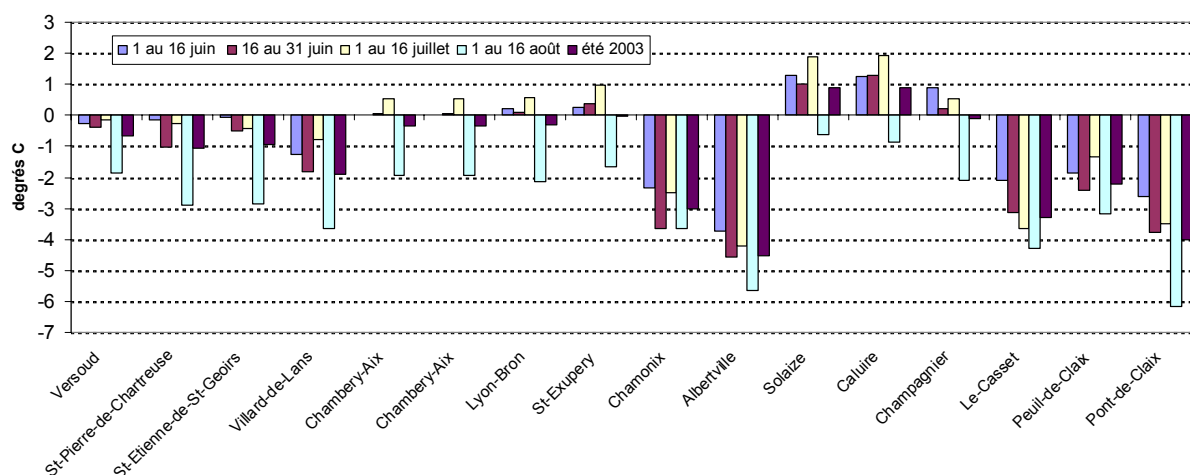


Figure 4-3. Biais moyen sur les températures maximales à 2 mètres simulées par MM5 sur le domaine régionale (résolution horizontale de 6 km)

Durant la période de canicule, le calcul MM5 présente la même caractéristique à tous les sites : une sous-estimation des températures maximales, avec des biais négatifs en dessous de -5°C à certaines stations opérées par des AASQA (Albertville, Pont-de-Claix). Si l'on s'intéresse aux stations du réseau Météo France, l'écart de température ne dépasse pas 4°C et est de 2°C en moyenne. Cette sous-estimation de la température maximale est très certainement liée à une mauvaise initialisation de l'humidité du sol et dans la suite du calcul à la mauvaise description du sol. En cas d'initialisation du sol à l'aide de rapports volumétriques en eau trop forts, l'énergie solaire absorbée par le sol va servir à évaporer l'eau contenue dans le sol et ne va pas être transférée sous forme de chaleur sensible à l'atmosphère. En terme de flux, le flux latent émis par le sol est surestimé et le flux sensible

sous-estimé. On se reportera à la discussion sur les flux de la partie 3.2.1, pour comprendre l'impact d'une telle erreur. Le modèle de sol utilisé dans notre calcul MM5 est un modèle à 5 couches semblable à celui de Metphomod, dans lequel une humidité de sol est fixée et ne varie pas. Une utilisation du modèle de sol Noah LSM aurait été intéressante mais des tests lors d'une précédente étude [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005] avaient montré que le modèle de sol Noah LSM était moins performant pour reproduire les systèmes de vent de vallée. En effet, ce modèle de sol prend en compte la variation de l'humidité du sol mais il pose des problèmes d'initialisation à partir des données grande échelle du Centre Européen à notre résolution et dans un relief complexe comme celui des vallées. Les conséquences d'une sous-estimation des températures maximales auront différents effets sur la modélisation chimique. On citera les effets les plus importants : une sous-estimation de la hauteur de la couche de mélange et des coefficients de mélange K_z par CHIMERE, des constantes cinétiques plus faibles et des émissions de COV biogéniques également plus faibles.

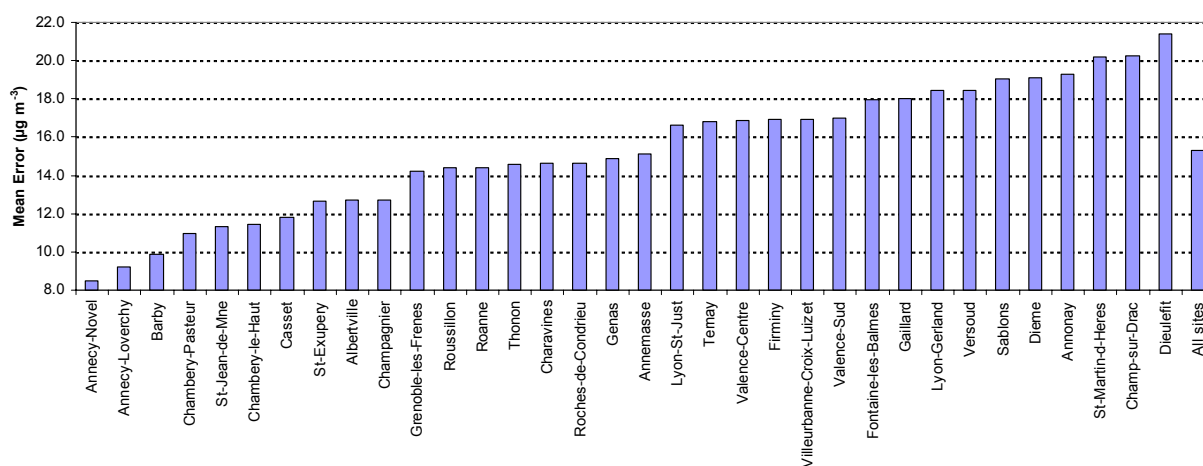


Figure 4-4. Erreur moyenne de CHIMERE sur les maxima journaliers d'ozone à différentes stations de la région Rhône-Alpes

Le modèle CHIMERE est utilisé dans la configuration décrite dans la partie 2.2.2. Les calculs sont réalisés par périodes de 15 ou 16 jours correspondant aux périodes du calcul MM5. La première période de calcul commence le 1^{er} juin 2003 à 0 h TU et la dernière s'achève le 1^{er} octobre 2003 à 0 h TU. Les concentrations en espèces gazeuses du modèle CHIMERE sur une période sont initialisées à l'aide du calcul réalisé sur la période précédente sauf pour la première période (du 1^{er} au 16 juin 2003) où les concentrations sont initialisées avec les données MOZART. Aucune assimilation de données relatives aux espèces chimiques n'est réalisée lors de l'initialisation du modèle. Cette méthode d'initialisation pourrait générer une dérive des concentrations en ozone, mais apparemment cela n'est pas le cas. Une comparaison des résultats de CHIMERE est réalisée à l'aide des mesures horaires en polluants réglementés en 45 sites opérés par les ASQAA dans la région Rhône-Alpes. CHIMERE fournit une concentration moyenne en polluant dans la première maille du modèle au-dessus du sol

(environ 50 m de hauteur). Cette concentration moyenne, grâce au mélange qui s'opère par convection au-dessus du sol est représentative de la concentration mesurée au sol grâce à une canne de prélèvement. Cela est moins vrai en cas stable lorsque des inversions basses induisent des gradients verticaux de concentrations importants dans les premières dizaines de mètres au-dessus du sol. Afin de s'affranchir de ces problèmes par cas stables, le modèle est comparé aux mesures en utilisant les maxima journaliers de concentration en ozone. Les sorties du modèle sont réalisées toutes les heures et les mesures sont des mesures moyennées sur une heure et indexées grâce à l'heure de fin de la période d'échantillonnage. Ainsi, la concentration à l'heure H du modèle est une concentration instantanée dans le calcul alors que la concentration à l'heure H des mesures est la moyenne des concentrations mesurées par l'analyseur entre l'heure H et l'heure H-1. La fréquence d'échantillonnage des analyseurs varie selon le polluant et le modèle de l'appareil. De nombreux indicateurs de performance ont été utilisés. Nous présentons ici les résultats pour l'erreur moyenne (ME) et le biais moyen (MB). Tous les indicateurs de performance sont décrits en annexe A.4.

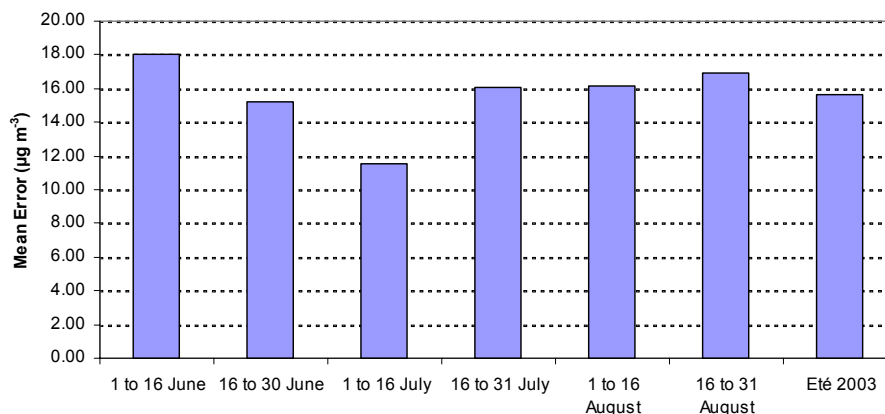


Figure 4-5. Erreur moyenne de CHIMERE sur les maxima journaliers d'ozone à 45 sites de mesures de la région Rhône-Alpes en fonction des périodes de l'été 2003

Du 1^{er} juin au 1^{er} septembre, l'erreur moyenne sur les maximums journaliers d'ozone aux 39 sites mesurant l'ozone est de $15,7 \mu\text{g m}^{-3}$. Le biais moyen (mesures-modèle) est de $-6,0 \mu\text{g m}^{-3}$. En moyenne sur l'été, le modèle aura tendance à surestimer les maximums journaliers d'ozone. Ces moyennes cachent de nombreuses disparités entre les sites et entre les différentes périodes. Sur la période de canicule, le modèle a eu tendance à sous-estimer les maxima journaliers d'ozone (biais positif). La figure 4-4 montre que, selon le site, l'erreur moyenne sur l'été 2003 est comprise entre $8,0$ et $22,0 \mu\text{g m}^{-3}$. On ne distingue pas de grande tendance en fonction de la localisation géographique des stations, cependant les stations de la cuvette grenobloise (Fontaine, Saint-Martin-d'Hères, Versoud, Champ-sur-Drac) présentent certaines des plus larges erreurs. L'erreur moyenne au site de Grenoble les Frênes est néanmoins inférieure à la valeur moyenne. En ce qui concerne la variabilité temporelle des résultats, la figure 4-5 montre que l'erreur moyenne à tous les sites est comprise entre 10 et 18

$\mu\text{g m}^{-3}$ selon la quinzaine considérée. De manière générale, les meilleurs résultats sont obtenus du 1^{er} au 16 juillet 2003. Ces résultats statistiques cachent des écarts entre sites et entre situations polluées ou non. La période du 1^{er} au 16 juillet 2003 était un épisode de pollution lors duquel les niveaux ont régulièrement augmenté dans l'atmosphère du 4 au 13 juillet 2003. Cette période correspond à une POI du programme POVA dans la vallée de Chamonix. Le système de modélisation utilisé pour POVA avait permis de bien décrire la pollution régionale pendant cette période [Brulfert, Chemel, Chaxel, and Chollet, 2005] et cette période a fait l'objet de simulations sur différents scénarios de réduction d'émissions dans les vallées. Cette comparaison modèle/mesures rapide a permis de montrer que le modèle décrit bien la photochimie régionale mais la résolution de 6 km ne permet pas encore de bien décrire les fortes valeurs d'ozones mesurées aux sites du Y grenoblois. Une description plus fine du relief est nécessaire pour obtenir de meilleurs résultats.

4.1.4. Calcul de la météorologie sur le Y grenoblois

Le calcul de la météorologie est validé à l'aide des données disponibles aux stations sol de la cuvette grenobloise opérées par Météo France, le CEA et l'ASCOPARG.

Température et humidité

Le modèle Metphomod est utilisé dans la configuration décrite au chapitre 2 sur le domaine de la figure 3-2. Les paramètres de sol ont été modifiés afin de prendre en compte le dessèchement important des sols et de la végétation durant les 14 jours de canicule (annexe B.2). Ainsi la teneur en eau du sol dans Metphomod est prise à 10 % et celle de la végétation à 20 %. La figure 4-6 fournit une validation de la température et de l'humidité par le modèle à la station du Versoud (vallée du Grésivaudan). Les températures minimales et maximales sont bien reproduites par le modèle. On rappelle que dans la comparaison, les températures mesurées à 2 mètres sont comparées aux sorties de modèle dans la première maille (centre de maille à 25 m au-dessus du sol). Ainsi les températures calculées par le modèle sont plus faibles lors des maximums journaliers et plus élevées lors des minimums. L'écart de température déterminé à partir des données de températures à 2 mètres et à 25 m (une interpolation de données à 20 m et 40 m permet d'évaluer la température à 25 m) au mât du CEA est de 2 K sur les maximales et de 3 K sur les minimales. La discrétisation verticale du modèle explique également que l'humidité et l'ozone simulés par le modèle la nuit s'écartent des mesures de la figure 4-6. La nuit, par conditions stables, la vapeur d'eau, libérée par le sol et la végétation, se concentre près du sol et dans la canopée. De la même manière, le NO va titrer l'ozone au sol. La déposition sèche va également faire diminuer la concentration en ozone dans les premiers mètres au-dessus du sol. Comme cité plus haut dans ce manuscrit, la résolution verticale du modèle ne permet pas de prendre en compte ces phénomènes.

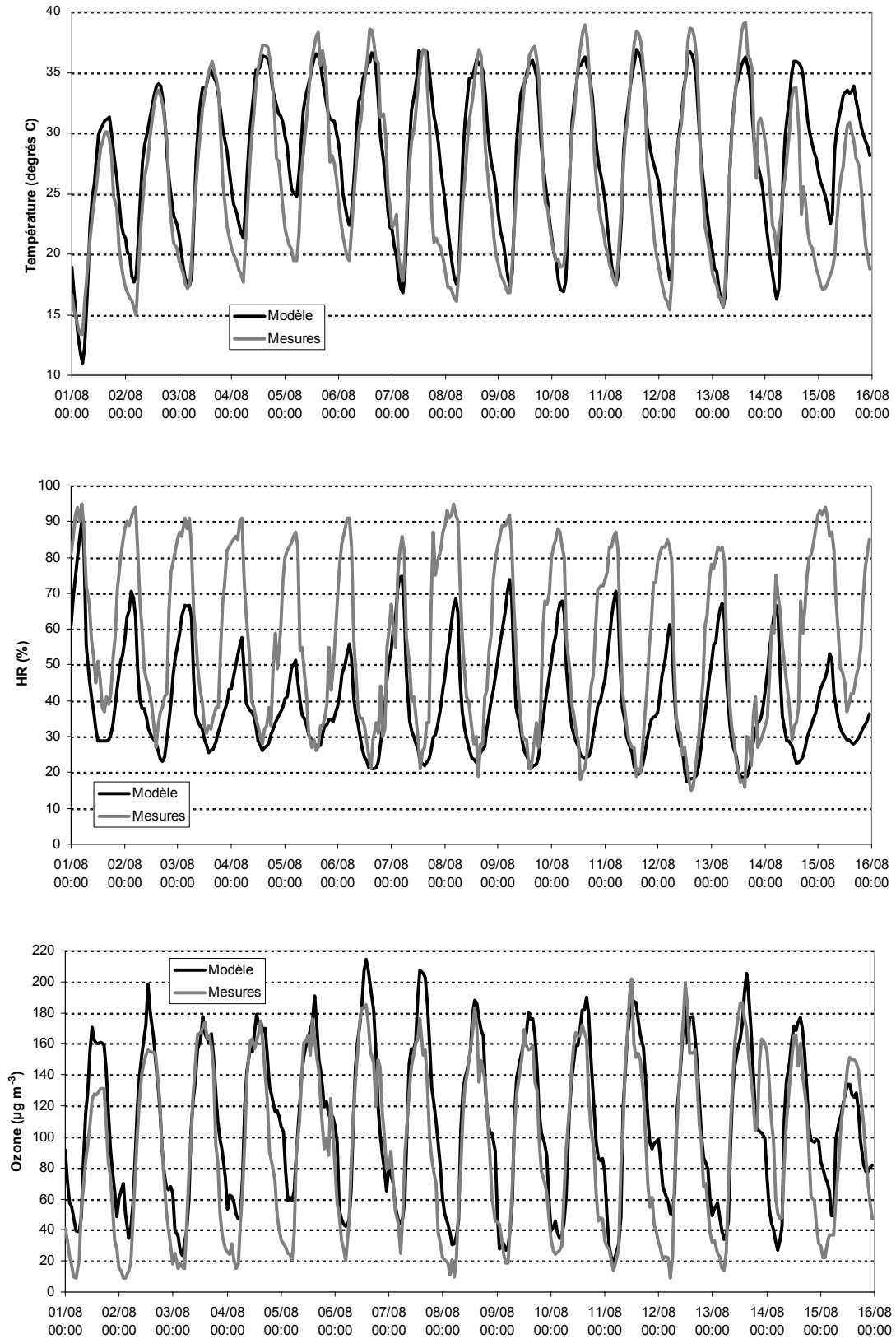


Figure 4-6. Validation pour la température, l'humidité et l'ozone à la station du Versoud (données ASCOPARG et Météo France)

Système de vent de vallée

Le cycle diurne du vent de vallée présenté dans la partie 3.1 est observé du 1^{er} au 14 août 2003 dans la cuvette grenobloise comme le témoigne les mesures et le modèle sur les figures 4-7 et 4-8.

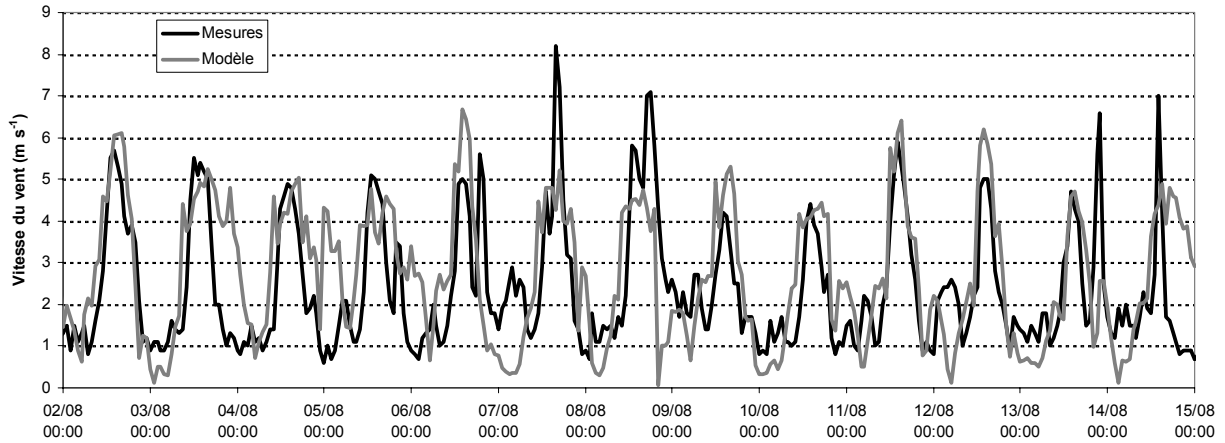


Figure 4-7. Vitesse du vent mesurée et simulée au Rondeau du 2 au 14 août 2003 (données ASCOPARG)

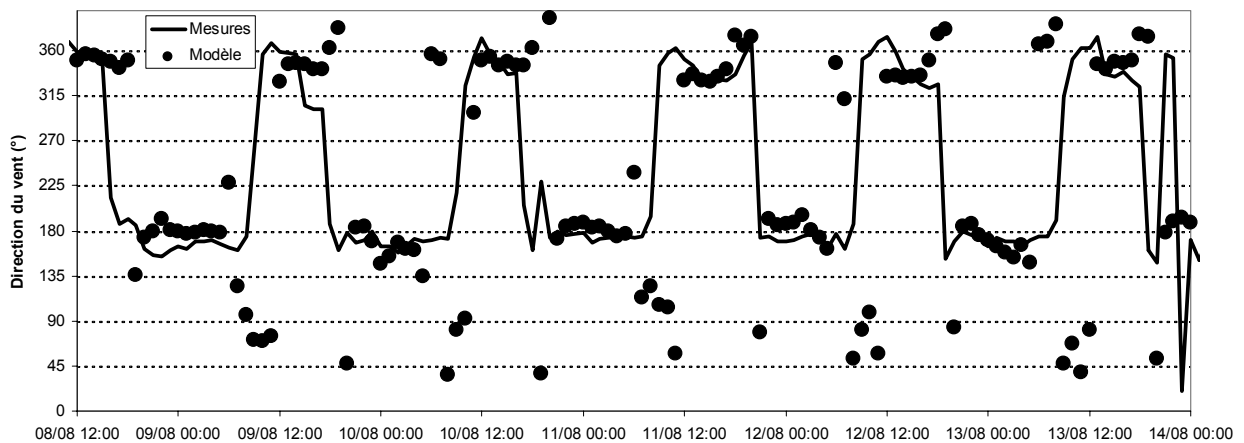


Figure 4-8. Direction du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix du 8 au 14 août 2003 (données ASCOPARG)

L'étude des données de direction et de vitesse de vent aux stations de mesure de la cuvette ne fait pas ressortir de variation notable du cycle de vent de vallée au cours de la période. Les données dont nous disposons sont des données moyennées sur une heure et cette résolution temporelle ne permet peut-être pas de déceler des changements du cycle. Les vitesses du vent de vallée de nord soufflant en moyenne de 13 h à 21 h HL sont de l'ordre de 5 m s^{-1} au Pont-de-Claix. Les 7 et 8 août 2003, les vitesses étaient respectivement de 8 et 7 m s^{-1} au plus fort de la journée. Ces vitesses élevées sont dues à la déstabilisation de l'atmosphère par un orage. La circulation synoptique semble avoir joué également un rôle important pendant les journées du 6, 7 et 8 août puisqu'une circulation identique à celle décrite dans la partie 3.1 pour la journée du 27 juillet 1999 est simulée. Comme montré dans la partie 3.1, cette circulation

conduit à l'élévation rapide des masses d'air au sud de l'agglomération et à un brassage plus important de l'ozone. Le 7 août, une dépression orageuse passe sur les Alpes (figure 4-9).

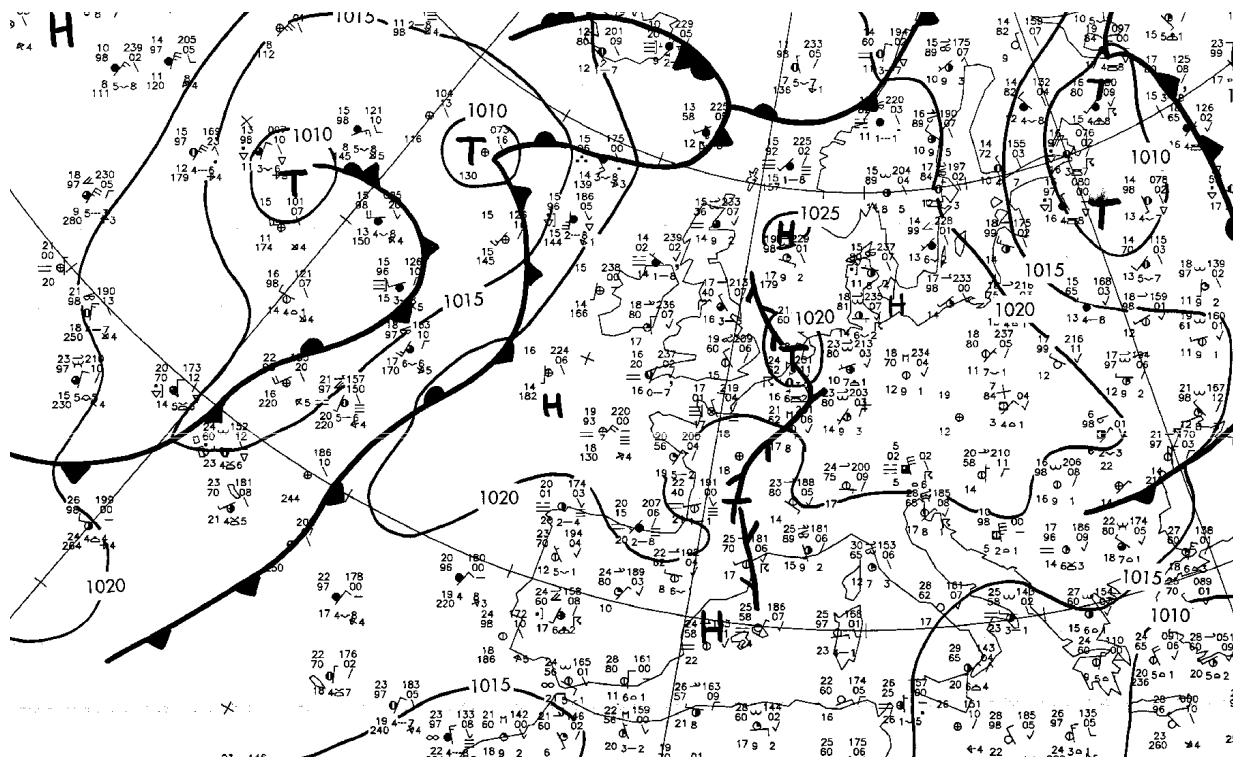


Figure 4-9. Carte d'analyse du 7 août 2003 à 6 h TU (Deutsche Wetter Dienst)

La figure 4-6 fournit une validation de l'ozone à la station du Versoud. Le cycle diurne de l'ozone est bien reproduit par le modèle. L'erreur sur les pics d'ozone journaliers dépend de la journée mais cette erreur ne dépasse pas $30 \mu\text{g m}^{-3}$ sauf les 1^{er} et 2 août et les 6 et 7 août. Les erreurs des deux premiers jours de la simulation peuvent être attribuées à l'influence des conditions initiales de MM5 (le calcul débute le 1^{er} août 2003 à 0 h TU). Comme on l'a souligné plus tôt, le 7 août est une journée particulière avec un développement orageux important et un ciel se voilant vers 18 h HL. Les valeurs moyennes des pics d'ozone journaliers (15 valeurs du 1^{er} au 15 août) simulées par le modèle sont représentées sur la carte de la figure 4-10. Les pics moyens mesurés aux stations de mesure sont localisés sur la carte. On remarque que les ordres de grandeurs des pics moyens mesurés et simulés sont très proches. La concentration d'ozone maximum au sol était en moyenne comprise entre 175 et $190 \mu\text{g m}^{-3}$. On remarque que selon les sites, on observe de grosses différences, même entre des sites très proches comme les sites urbains de Saint-Martin-d'Hères et de Grenoble les Frênes. Les sites périurbains ne sont pas ceux où sont systématiquement mesurés les pics d'ozone les plus élevés puisque les sites de Fontaine et de Saint-Martin d'Hères ont des moyennes très élevées, de respectivement 190 et $191 \mu\text{g m}^{-3}$ pour la mesure. Le site de Charavines avec un pic moyen mesuré de $176 \mu\text{g m}^{-3}$ est bien décrit par le modèle. Le pic d'ozone moyen de $173 \mu\text{g m}^{-3}$ mesuré au Versoud est plus faible que les pics moyens simulés

dans la zone ($180 \mu\text{g m}^{-3}$). Les sites de Champ-sur-Drac et de Champagnier, bien que très proches, ont mesuré respectivement des pics moyens de $191 \mu\text{g m}^{-3}$ et $177 \mu\text{g m}^{-3}$. Ces écarts s'expliquent surtout par des effets dynamiques locaux et des émissions de NO_x plus ou moins importantes à proximité du site. A Champ-sur-Drac, des concentrations d'ozone très élevées sont observées très tôt dans la journée, vers 12 h HL. Ces observations sont faites certains jours des deux semaines de canicule : les lundi, mardi et mercredi. Etant donné qu'aucun signal semblable n'est détecté à Champagnier et que les jours d'occurrence du phénomène sont réguliers, ces pics sont certainement dus à un procédé industriel sur le pôle industriel de Champ-sur-Drac. L'analyseur d'ozone situé à proximité semble interférer avec le mercure présent dans l'atmosphère du pôle industriel.

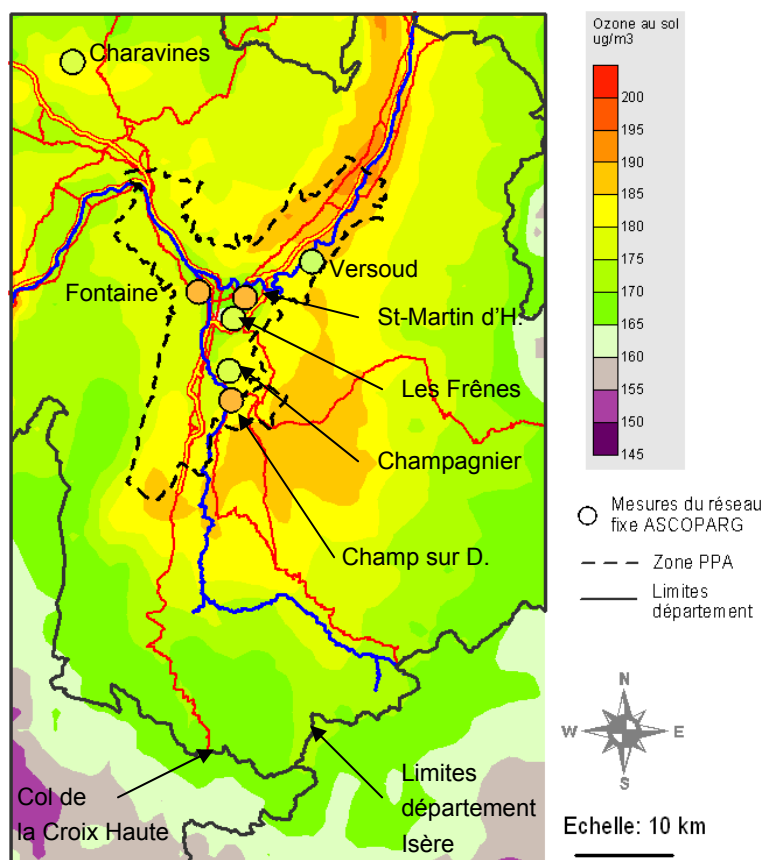


Figure 4-10. Moyenne des pics d'ozone simulés du 1^{er} au 15 août 2003 sur le domaine de Grenoble (échelle de couleur) et mesurés (points)

La carte de la figure 4-10 montre bien l'impact de l'agglomération grenobloise sur les concentrations en ozone dans le sud de l'Isère. Le panache au sud de l'agglomération s'étend jusqu'au col de la Croix Haute. Arrivé sur les reliefs, le panache va être transporté en altitude et dilué par les vents de pente. La présence de zones de convergence comme celles créées par la rencontre du vent de vallée et du vent synoptique va générer des ascendances importantes qui vont transporter l'ozone en altitude. D'après la figure 4-10, la production locale de

l'agglomération grenobloise au maximum de concentration du panache au sol est en moyenne responsable de $40 \mu\text{g m}^{-3}$ de l'ozone contenu dans le panache. Ce résultat utilise l'hypothèse que le fond d'ozone est en moyenne de $155 \mu\text{g m}^{-3}$ sur les 15 jours de canicule. Cette quantité d'ozone produit localement varie de jour en jour et dépend des concentrations d'ozone dans la troposphère libre et dans la CLA des régions avoisinantes. La partie suivante propose une meilleure estimation de la production locale d'ozone jour après jour.

4.1.5. Production locale d'ozone et régime de production de l'ozone

D'après les radiosondages de Payerne de la figure 4-2, l'apport d'ozone depuis l'extérieur du modèle varie fortement d'un jour à l'autre. Ces variations s'expliquent par le changement du régime de vent synoptique au cours de la période de canicule qui transporte différemment l'ozone produit dans les régions avoisinantes. L'introduction de l'espèce passive O_3^R introduite au chapitre 3 dans le modèle chimique permet de tracer l'ozone régional entrant aux frontières latérales du modèle. Dans un second temps, il est intéressant de voir si des apports importants d'ozone de l'extérieur modifient le régime de production de l'ozone dans le Y grenoblois. Ce régime avait été étudié par Couach et al. [2004] pour les trois jours de la POI 1 de GRENOPHOT99. Pour cet épisode de 1999, le régime de production de l'ozone au sud de l'agglomération était limité par les NO_x lors des maximums d'ozone à 17 HL.

Les radiosondages de Payerne montrent que la direction du vent avait tendance à varier de manière importante au cours de la période de canicule. Ces variations induisent au niveau local des processus de transport, de mélange et de production d'ozone différents, comme l'a montré la partie 3.1. La figure 4-11 présente une coupe selon un plan vertical dans la direction sud-nord pour différentes journées. Cette coupe passe par le centre de l'agglomération grenobloise. La figure montre que le vent de vallée se développe et interagit différemment avec le vent synoptique selon la journée. Sur ces schémas, les vecteurs vent ont pour coordonnées (v,w) . Les 3, 4 et 5 août, la circulation simulée est semblable à celle du 27 juillet 1999. Le panache d'ozone se déplace vers le sud de l'agglomération au sein du vent de vallée qui se développe dans la vallée du Drac et sur le plateau du Trièves. Arrivé au-dessus du plateau du Trièves, le vent de vallée entre en compétition avec le vent de sud soufflant dans le sud du Vercors en dessous de 3000 m. A la convergence des deux masses d'air, l'air est piégé à l'ouest par le massif du Vercors et à l'est par les massifs du Dévoluy et de l'Oisans. Par conservation de la masse, l'air se soulève et une circulation complexe est générée. Cette ascendance, observée sur les simulations, s'accompagne d'une recirculation de l'air emmené en altitude de part et d'autre de l'ascendance. Ce mécanisme va transporter l'ozone à 4000 m d'altitude. Un transport d'ozone à cette altitude est rarement observé sur sol plat. On remarque que ce phénomène se développe de manière identique les 3, 4 et 5 août.

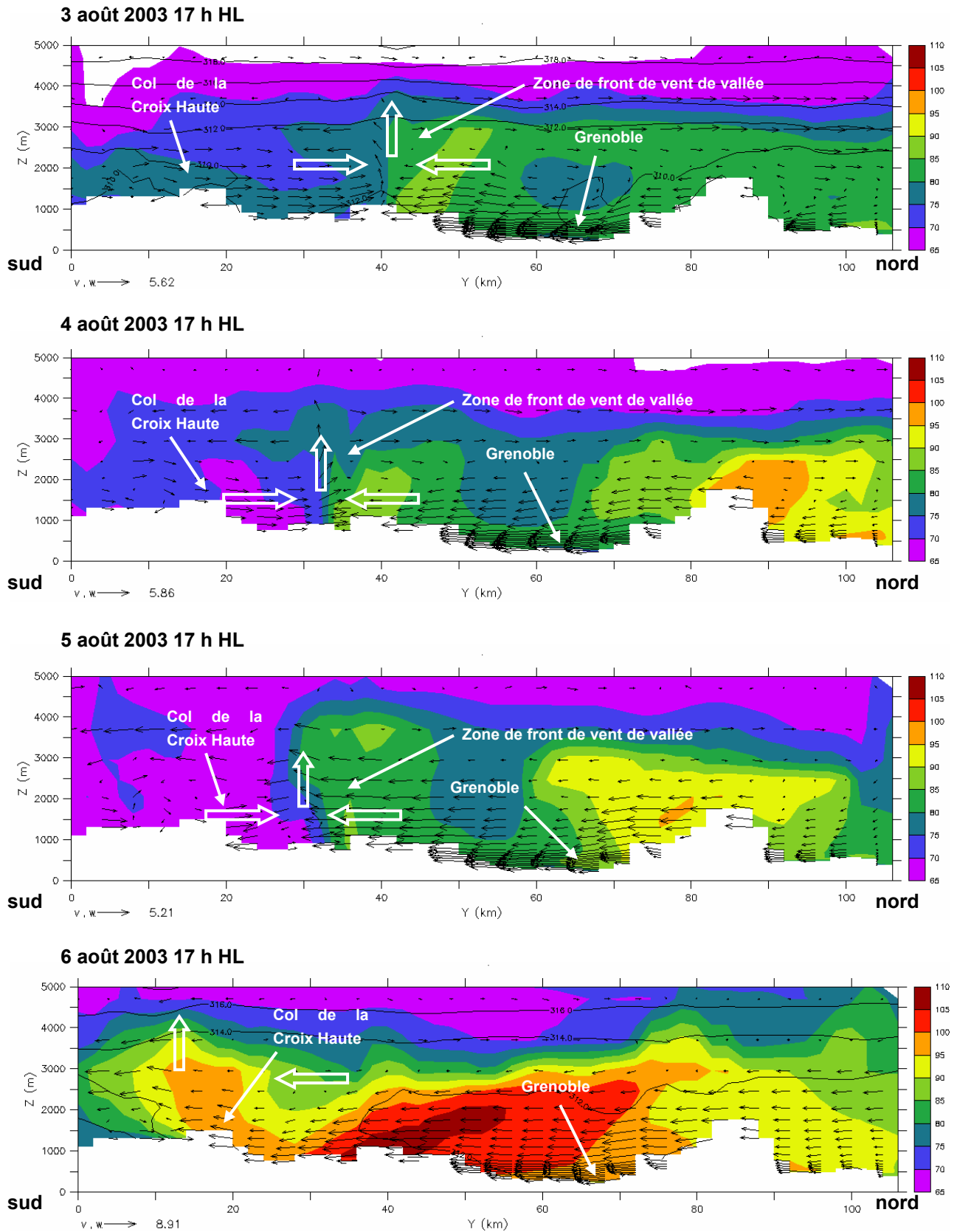


Figure 4-11. Ozone en ppbV (échelle de couleur) et vent (vecteurs) simulés à 17 h HL dans un plan vertical nord-sud passant par Grenoble (en UTM 31, $x = 615$ km) pour les 3, 4, 5 et 6 août 2003. Les vecteurs vents ont pour coordonnées (v, w) . Les 3 et 6 août les isocontours de température potentielle virtuelle sont représentés.

Le 6 août, avec l'absence de vent synoptique de sud, le vent de vallée se développe sur tout le plateau du Trièves. Arrivé au niveau du col de la Croix Haute au sud du plateau, l'air advecté par le vent de vallée est transporté et mélangé en altitude au-dessus du col. Ce mélange vertical est également visible grâce aux valeurs de TKE. Ce mécanisme participe également à injecter de l'ozone à des altitudes élevées caractéristiques de la troposphère libre. La production d'ozone dans le panache de l'agglomération de Grenoble est plus importante le 6 août que les 3 jours auparavant. On définit la production locale par l'expression (4.1).

$$pO_3^{loc} (ppbV) = O_3 - O_3^R \quad (4.1)$$

où O_3 est la concentration d'ozone calculée par le modèle et O_3^R la concentration en traceur de l'ozone régional introduit au chapitre 3. On parlera de pourcentage de production locale en calculant le rapport (4.2).

$$pO_3^{loc} (\%) = \frac{O_3 - O_3^R}{O_3} \quad (4.2)$$

La production locale de l'agglomération dépend fortement de la journée comme le montre les figures 4-11 et 4-12 pour ce qui est de la quantité d'ozone produit et de la localisation géographique au sol. On a montré que le 4 août, le régime de vent de vallée interagissait avec le vent synoptique de sud alors que le 6 août le vent de vallée se développait librement au sud de l'agglomération grenobloise. La situation de compétition de vent de vallée et de vent synoptique semble causer une production d'ozone dans l'agglomération plus importante que les jours où le vent de vallée est libre. Dans le cas d'un vent de vallée libre, les précurseurs de l'ozone émis par Grenoble sont transportés vers le sud et mélangés par le vent de vallée. Lorsque le vent de vallée entre en compétition avec le vent synoptique, le vent de vallée est ralenti et les polluants sont confinés au sein de la CLC. La partie 3.1 a montré que la présence de la couche de vent de sud limitait le développement de CLC. Ainsi dans cette configuration, la CLC se développe à des hauteurs plus faibles et l'apport d'air de la TL est limité. Dans le cas où la CLC est libre de se développer, l'apport d'air de la TL est plus important et la production locale d'ozone est diluée.

La figure 4-12 montre que la répartition géographique de la production locale dépend de la journée. L'étude de toutes les journées de la période de canicule montre que l'on peut les classer suivant les deux types de jour présentés au chapitre 3 : les journées durant lesquelles le vent de vallée se développe normalement sans interagir avec le régime synoptique, durant ces journées, la CLC se développe librement, on parlera de régime de CLC libre. Pour les journées durant lesquelles le vent de vallée entre en compétition avec le vent synoptique et est piégé sous la couche de vent de sud, on parlera de régime de CLC piégée.

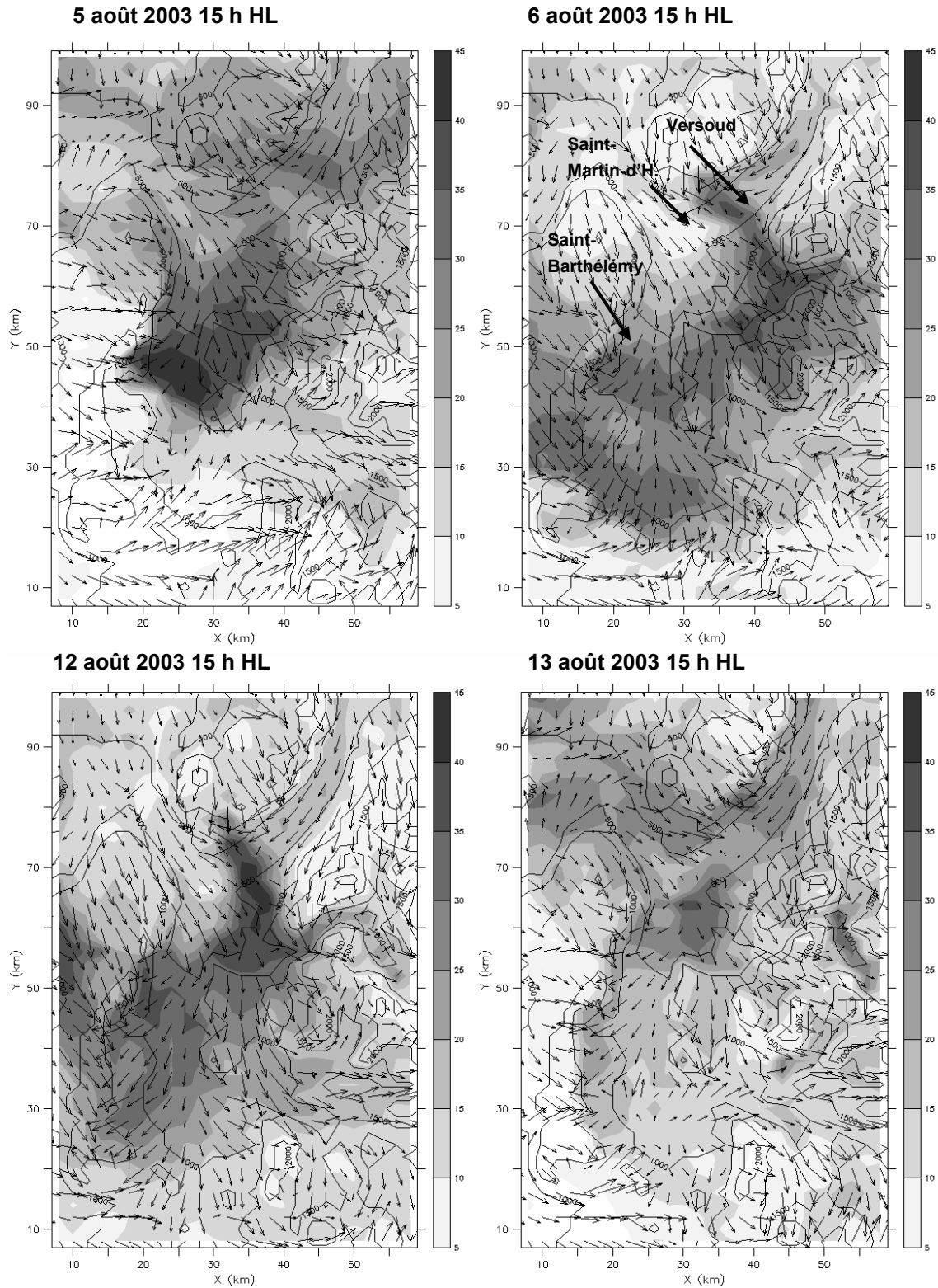


Figure 4-12. Production locale de l'ozone pO_3 en ppbV simulée le 4, 6, 12 et 13 août 2003 à 15 h HL

Pour des journées où la CLC est libre, la production locale se réalise dans deux zones (journées du 6 et 12 août sur la figure 4-12). La première est le bas Grésivaudan. Cette zone de convergence entre les circulations de vent de vallée dans la cluse de Voreppe et la

circulation du Grésivaudan est une zone avec des vitesses de vent très faibles à cause de la convergence. Les niveaux d'ozone importants mesurés à Saint-Martin d'Hères sont certainement dus à la présence de cette convergence. La station du Versoud est située au nord de cette convergence, ce qui explique que les niveaux d'ozone y soient plus faibles. Des études analytiques sur des vallées avec une géométrie en Y identiques ont montré que les zones de convergence en Y posaient des difficultés de description. Le modèle montre la présence de cette convergence mais son emplacement géographique est certainement légèrement plus au sud, en bordure nord-est de l'agglomération grenobloise. La seconde zone où la production d'ozone est forte est le sud de l'agglomération avec deux sous-zones : l'entrée de la Romanche et la basse vallée du Drac. L'entrée de la Romanche est également un site particulier où les vents de vallées interagissent de manière complexe. Le rejet de précurseurs de l'ozone dans la zone de Pont-de-Claix accentue certainement la production d'ozone. La basse vallée du Drac recueille la majorité des émissions de précurseurs de l'ozone de Grenoble par régime de vent de vallée. La production d'ozone dans ce panache avait été étudiée de manière assez complète par Couach [2002]. Les concentrations d'ozone mesurées au site de Saint-Barthélémy durant les étés 1998 et 1999 sur le versant est du Vercors, avaient bien montré la présence de ce panache. Couach avait évalué la production locale au sein du panache dans la région au sud de Grenoble entre 50 et 70 ppb pour la journée du 20 juillet 1998 [Couach, 2002]. Ces valeurs semblent un peu élevées pour notre période d'étude. Plus au sud, sur le plateau du Trièves, le panache de l'agglomération est mélangé dans la CLC par convection et par le vent de vallée avec de l'air pauvre en précurseurs de l'ozone. Cet air provient soit de la troposphère libre, soit de la CLA non polluée des régions avoisinantes. La part d'ozone produit par Grenoble au-dessus du Trièves diminue alors. Lorsque la CLC est libre, la production d'ozone sur le plateau du Vercors est importante.

Par régime de CLC piégée sous le vent de sud, la distribution géographique est légèrement différente (journée du 5 août sur la figure 4-12). La production d'ozone dans le panache de l'agglomération dans la basse vallée du Drac est beaucoup plus importante. La part de la production locale au maximum du panache atteint 40 % de l'ozone total simulé au sol. Même au centre de ville de Grenoble, où les émissions de NO sont importantes, la production locale d'ozone est perceptible avec une estimation de 10 à 20 % de cette part locale par le modèle. Lorsque la CLC est piégée, la production d'ozone sur le plateau du Vercors est très faible puisque le vent dilue rapidement les précurseurs présents dans l'atmosphère.

Les 13 et 14 août 2003 sont des journées particulières puisque la production d'ozone était beaucoup plus homogène autour de l'agglomération grenobloise. Ceci est dû à un vent de vallée plus faible, particulièrement le 14 août.

4.1.6. Conclusion sur l'épisode de canicule

La modélisation de l'épisode de canicule d'août 2003 a montré que le mélange vertical dans les vallées était bien plus important que durant l'épisode de juillet 1999 décrit dans le chapitre 3. Les hauteurs de CLC en août 2003 dépassaient 3500 m agl. Ce mélange important a eu pour conséquence de transporter l'ozone produit dans la CLC à des altitudes très élevées, caractéristiques en temps normal de la troposphère libre (TL). Dans la région de Grenoble, le régime de vent de vallée a interagi avec le vent synoptique assez fréquemment suivant le même mécanisme que celui présenté dans la partie 3.1. On distingue alors deux régimes. Un régime de CLC libre où l'absence de couche de vent de sud en altitude autorise le développement du vent de vallée au sud du Vercors et un régime de CLC piégée sous une couche de vent de sud qui va limiter son développement et confiner les précurseurs d'ozone à proximité de l'agglomération. Le modèle a ainsi montré que la production d'ozone dans le panache de l'agglomération était dépendante du régime : CLC libre ou piégée. La production locale d'ozone est plus importante en régime de CLC piégée. Cette production locale est d'environ 40 % de la concentration maximum dans le panache au sud de l'agglomération en régime de CLC piégée contre 30 à 35 % en régime de CLC libre (figure 4-13).

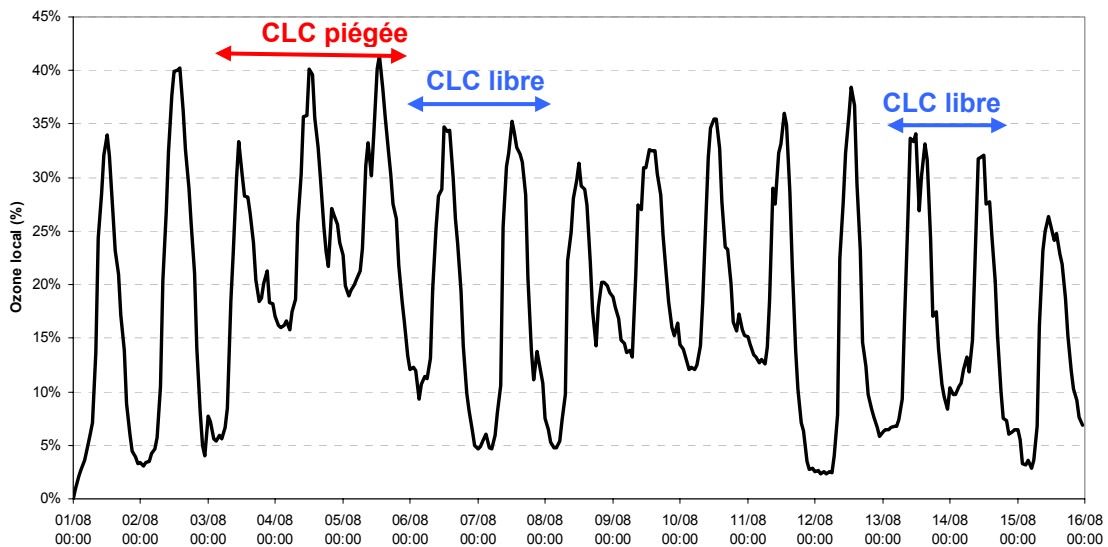


Figure 4-13. Part locale de l'ozone simulé lors du maximum d'ozone au sud de l'agglomération grenobloise défini par une boîte en UTM 31 ($x = 700$ à 730 km ; $y = 4960$ à 4990 km ; $z = 1500$ à 2500 m)

La différence en les deux régimes est plus frappante la nuit où l'ozone produit localement est stocké dans la couche réservoir de manière plus efficace par régime de CLC piégé. Pour ces journées, l'ozone produit localement représente en moyenne 15 à 20 % de l'ozone total présent la nuit au sud de l'agglomération contre 5 à 10 % pour des journées où la CLC est libre.

L'apport de la région de Grenoble aux concentrations d'ozone mesurées à 4000 m durant la période de canicule est indéniable. La modélisation a montré que le transport de l'ozone produit au sud de l'agglomération puis son élévation rapide au-dessus des reliefs est un mécanisme qui contribue à faire augmenter rapidement les niveaux d'ozone dans la troposphère libre (TL). Les mécanismes mis en jeu en régime de CLC libre sont semblables à ceux déjà décrits par des programmes comme VOTALP. Les vents de pente jouent un grand rôle pour injecter l'ozone dans la TL par effet cheminée. En régime de CLC piégée, la convergence de masse d'air va créer des ascendances qui vont injecter l'ozone dans la TL. Des phénomènes météo très particuliers, tels les entrées marines, jouent un grand rôle dans la dynamique de la période de canicule dans la région des Alpes du Sud. MM5 a détecté lors de cette période de fortes interactions de la circulation atmosphérique dans le bassin méditerranéen avec la circulation autour du relief alpin. La description de ces circulations à mésoéchelle par les modèles utilisés pour notre étude reste à être validée. Les effets de convergence de masses d'air semblent notamment jouer un rôle important dans la région des Préalpes du Sud. Le développement de ces points sort du cadre de cette thèse.

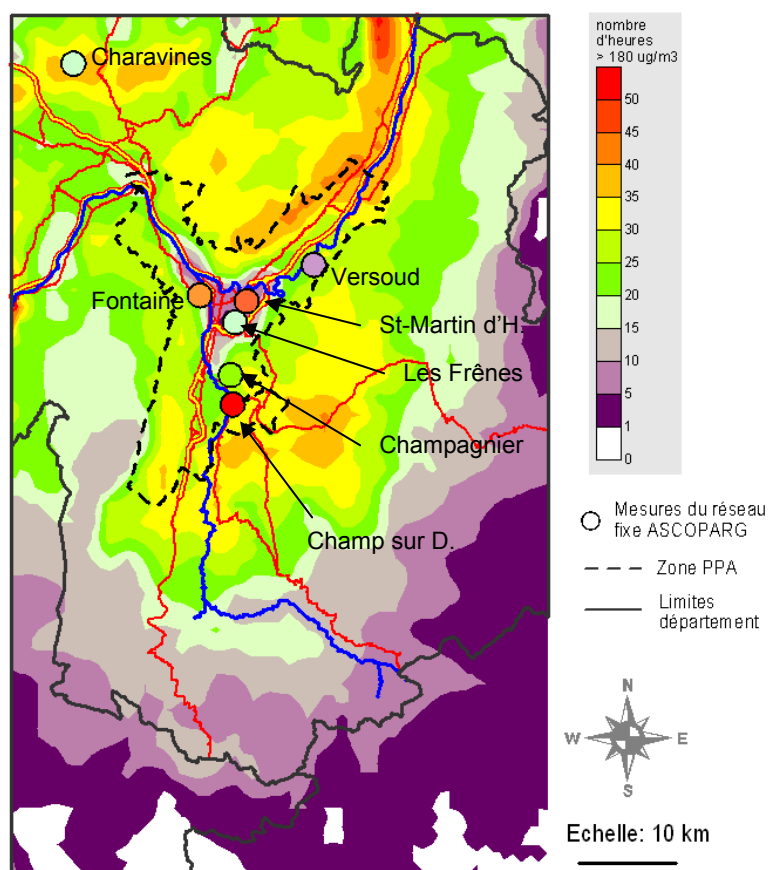


Figure 4-14. Nombre de dépassements du seuil 180 µg/m³ simulés (couleurs) et mesurés (points)

Par l'étude du seuil 180 µg m⁻³ en moyenne horaire aux stations de mesure, le modèle fournit sur la figure 4-14 une estimation du nombre de dépassements de ce seuil sur une heure qui

montre bien l'impact de l'agglomération grenobloise sur les alentours. Les zones rurales en bordure d'agglomération sont sujettes à un nombre plus important de dépassements car les émissions de NO_x dans ces zones sont plus faibles et la réaction de titration de l'ozone par le NO est ainsi limitée. La déposition sèche joue également un grand rôle dans la détection des dépassements du seuil $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en zones rurales. Ces points seront discutés dans le chapitre 5 avec le calcul des concentrations moyennes hebdomadaires d'ozone au sol. Le nombre de dépassements simulés est comparable aux valeurs simulées par [Vautard, Honoré, Beekmann, and Rouil, 2005] pour d'autres agglomérations françaises. Le gros défi des années à venir sera de représenter de manière précise les agglomérations pour obtenir une description fine des concentrations d'ozone en milieu urbain. Une solution serait le couplage de modèles de rue à des modèles eulériens comme ceux utilisés dans notre chaîne PREVALP. En effet, à cause de la cinétique rapide de la réaction de l'ozone avec NO, la variabilité des concentrations d'ozone à l'échelle de la rue est importante.

Météo France prévoit selon ses simulations climatiques une multiplication par 5 de la fréquence des événements de fortes chaleurs (températures maximales supérieures à 35°C) d'ici la fin du XXI^{ème} siècle. Il est important de se doter dès à présent des outils qui permettent de savoir quelles actions prendre au niveau international, national et local pour limiter les pollutions par l'ozone et ses polluants secondaires associés (particules, PAN, HNO_3). Cet épisode de canicule a en effet montré que pour réduire de manière efficace les niveaux d'ozone, une réduction des émissions de précurseurs de l'ozone au niveau régional et national est nécessaire (annexe C). Afin de fournir un ordre de grandeur des incertitudes sur la production d'ozone calculée par le modèle Metphomod, le chapitre 6 présente des simulations de l'impact de la température, de l'humidité du sol et des émissions de COV biogéniques sur la production d'ozone lors de cet épisode de canicule.

4.2. Application de la chaîne de modèles pour l'étude d'un fort épisode de pollution hivernale en février 2005

Introduction

Les épisodes hivernaux ont été très peu étudiés à l'aide de modèles à mésoéchelle. Les modèles eulériens en trois dimensions ont été massivement utilisés pour l'étude de la photochimie qui fait intervenir des phénomènes non linéaires justifiant l'utilisation de modèles complexes. Les polluants étudiés en période hivernale sont très souvent des polluants primaires qui s'accumulent à proximité du sol dans des couches stables. De nombreuses approches consistent à étudier les phénomènes de mélange et de transport sur une ou deux dimensions. Dans de nombreux cas, à l'aide de symétries, un calcul sur la verticale ou dans la

direction du vent dominant est suffisant pour décrire la situation générale. Dans un terrain très complexe comme le relief de la région grenobloise ou les vallées alpines, un modèle à 3 dimensions est requis. En effet chaque vallée possède son propre régime de vent de vallée et les vallées interagissent entre elles pour créer des systèmes très complexes sans axe de symétrie, ni direction caractéristique.

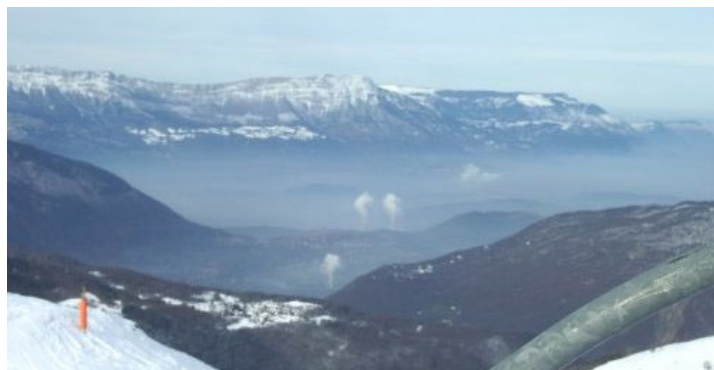


Figure 4-15. Vue sur les vallées du Drac et de la Romanche depuis la station de l'Alpe du Grand Serre le 9 janvier 2006 lors d'une journée sans vent

De nombreux problèmes ont été soulevés quand à l'utilisation des modèles météorologiques en cas stables et très stratifiés [Zängl, 2002]. Après quelques modifications du code et avec des paramètres de sol adaptés au cas hivernal, le modèle Metphomod a été utilisé pour simuler la météorologie et la chimie. Le calcul est validé grâce aux mesures sol disponibles, aux radiosondages de Lyon, avec des données du mât météorologique du CEA Grenoble et à l'aide des résultats d'une campagne régionale de cartographie du benzène et du NO₂ par tubes à diffusion réalisée par les AASQA de la région Rhône-Alpes. Nous présentons dans cette partie l'étude de l'épisode du 1^{er} au 15 février 2006 pour la région de Grenoble. Cet épisode est repris dans le chapitre 5 pour sa validation avec une campagne de mesures à base de tubes à diffusion passive. Dans cette partie, nous donnons tout d'abord des éléments de validation du calcul à l'aide de données météo sélectionnées et en se focalisant sur des polluants comme le benzène et les PM₁₀. On montre ensuite, à la lumière des résultats de simulation, comment les vallées participent au bilan du benzène et de l'aérosol de la région et quels mécanismes entrent en jeu lors de la création et de la destruction d'inversions thermiques en vallée.

4.2.1. Situation météorologique grande échelle

Les deux premières semaines de février représentent un épisode hivernal de pollution classique dans les vallées alpines. Une inversion grande échelle associée à des vents faibles en altitude empêche la couche limite de se développer en sommet de crête de vallée et empêche ainsi les polluants émis dans la vallée de quitter celle-ci. Cette situation se rencontre typiquement en hiver lorsque l'énergie solaire reçue par le sol n'est pas suffisante pour créer

des mouvements verticaux suffisamment haut pour rompre le couvercle au-dessus de la vallée, ni à développer un vent de vallée suffisamment fort pour disperser les polluants. Cet épisode de février 2005 se distingue plus par sa durée que par son intensité. Le 2 février, une perturbation quitte la région Rhône-Alpes pour laisser la place à un temps anticyclonique. Les radiosondages de Lyon Saint-Exupéry de la figure 4-16 montrent la présence d'une inversion thermique très basse (toit à 1000 m d'altitude) du 2 au 5 février dans la vallée du Rhône. Dans la journée du 5 février, cette inversion disparaît sous l'effet d'un régime de sud s'installant dans la vallée du Rhône. Un bref passage nuageux le 6 au matin fait place de nouveau à un soleil radieux. L'inversion va se reformer le 6 février, aux alentours de 500 m au-dessus du sol, pour disparaître seulement le 10 février. Le 11 février un temps plus perturbé gagne la région. Le 14 février, une perturbation nordique touche la région et il neige abondamment en plaine le 15 février, c'est la fin de l'épisode de pollution.

4.2.2. Situation météorologique de la vallée

Malgré un bon réchauffement du sol pendant la journée, le rayonnement solaire ne fournit pas assez d'énergie au sol pour que les mouvements verticaux convectifs générés par celui-ci ne réussissent à détruire l'inversion thermique dans la cuvette grenobloise. Ainsi les polluants ont été confinés dans le fond de la cuvette pendant plusieurs jours. L'air peut néanmoins pénétrer ou s'échapper de la cuvette par plusieurs voies :

1. la cluse de Voreppe où l'on observe un régime de vent de vallée ;
2. le Grésivaudan où des légers vents de nord-est apportent de l'air dans la cuvette ;
3. la vallée de la Romanche ;
4. la vallée du Drac au sud de Grenoble où l'on observe un régime de vent de vallée ;
5. le long des pentes des versants montagneux en présence de thermiques.

En hiver, le cycle diurne du vent de vallée est observé sur le site du CEA. Inversement à l'été, le vent thermique nocturne est plus fréquent que le vent thermique diurne et également plus fort (figure 4-18). Par conditions de vents forts et en absence de régime de vent de vallée, le vent entre dans la cuvette par la cluse de Voreppe (direction nord) le 2 février et les 14 et 15 février. Le cycle du vent de vallée est nettement observé durant la période anticyclonique du 5 au 10 février 2006 sur la figure 4-17. Selon les jours, la durée durant laquelle on observe le vent diurne de nord est différente. On distingue deux types de journées. Du 5 au 7 février, le vent thermique de nord a été observé de 14 h à 21 h HL en moyenne alors que du 8 au 10 février, il a été observé à peine une heure par jour (figure 4-17). Ces différences sont certainement dues à des interactions du régime de vent local avec le régime de vent dans la plaine iséroise située au nord à la sortie de la cluse de Voreppe. Les radiosondages de la figure 4-16 montrent que le régime de vent dans la vallée du Rhône (en dessous de 750 hPa) était de sud du 5 au 7 février et était de nord le reste de la période anticyclonique.

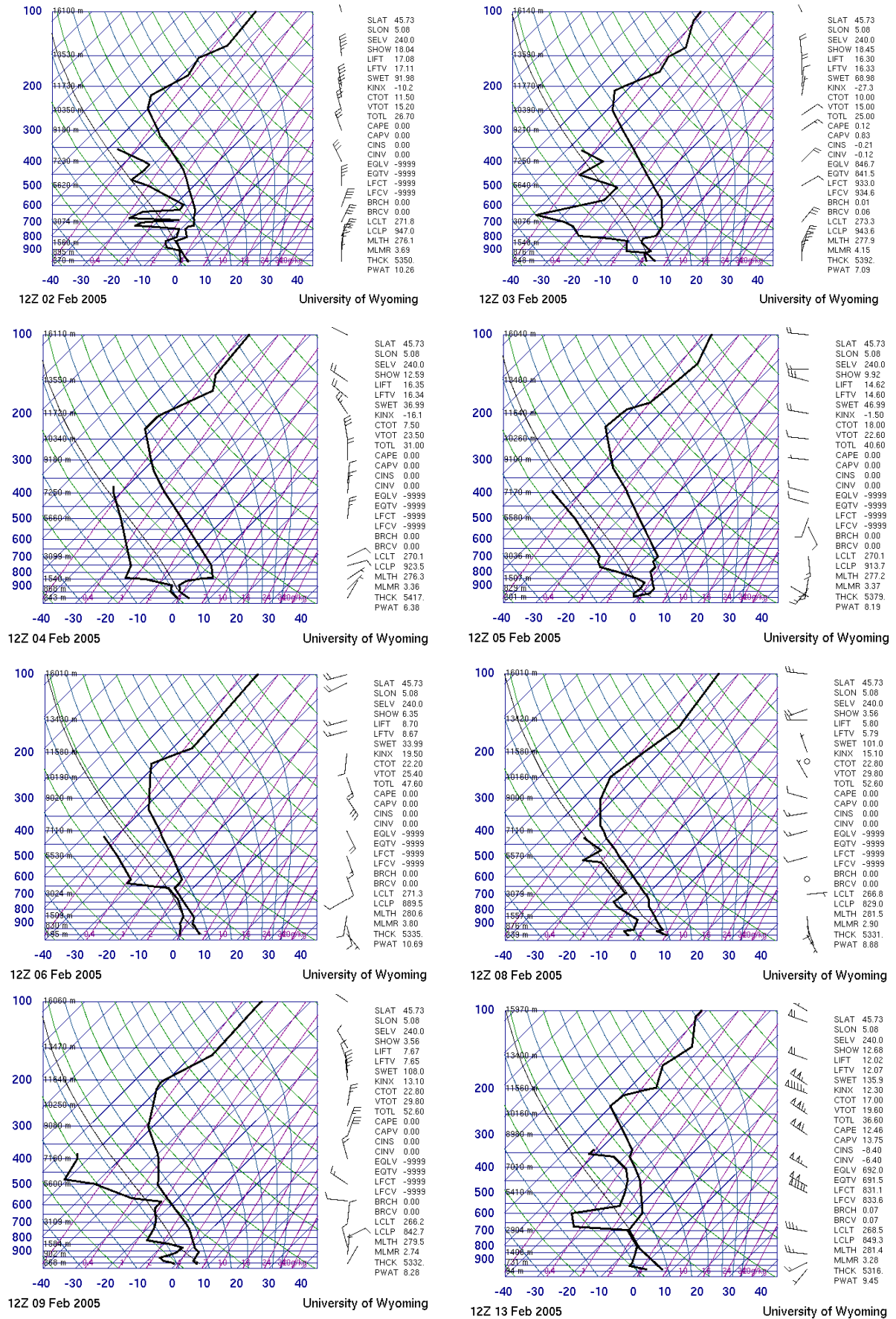


Figure 4-16. Radiosondages réalisées à Lyon Saint-Exupéry du 2 au 15 février 2005 (données Université du Wyoming)

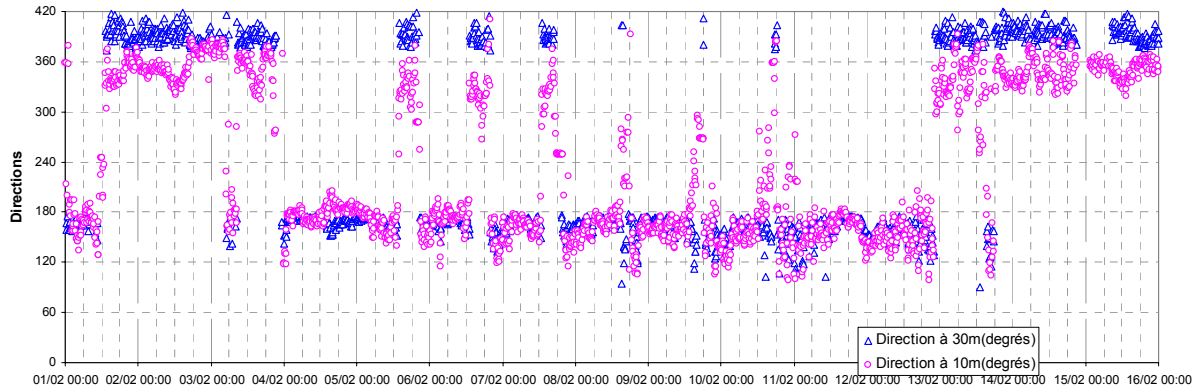


Figure 4-17. Direction du vent mesurée sur le pylône du CEA aux altitudes 10 et 30 m. Pour plus de lisibilité, la direction est corrigée de $+60^\circ$ à 30 m

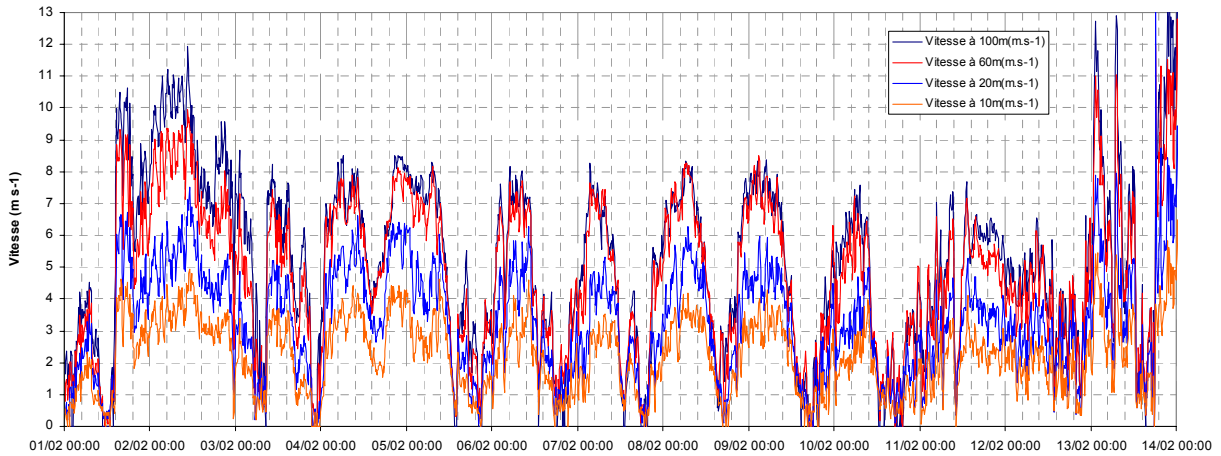


Figure 4-18. Vitesse du vent horizontal mesurée à différentes hauteurs sur le mât du 1 au 13 février 2005

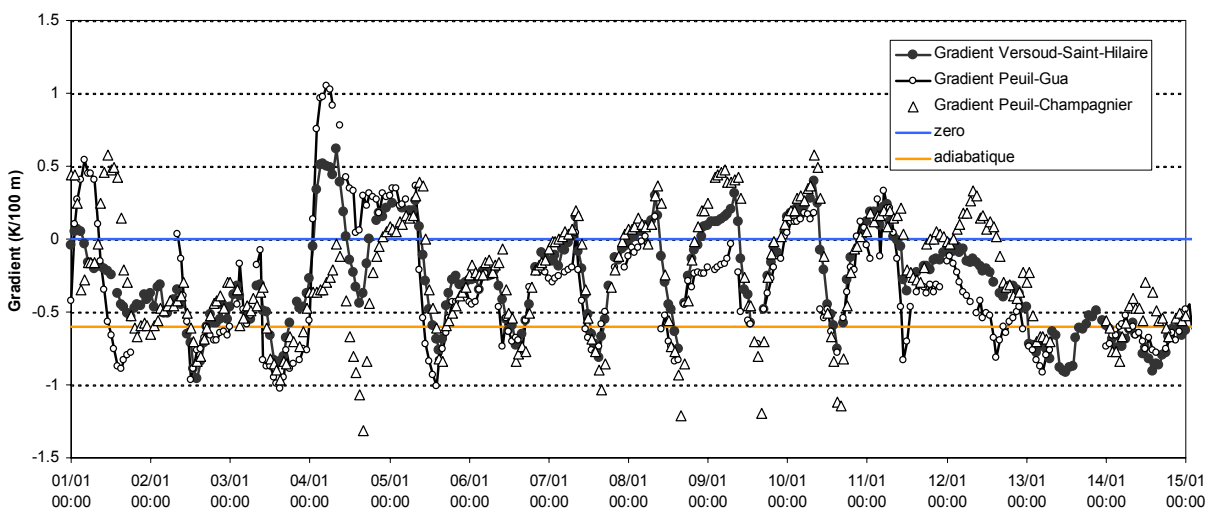


Figure 4-19. Gradient thermique vertical $\partial T/\partial z$ mesuré entre 5 stations météorologiques de la cuvette grenobloise du 1^{er} au 15 février 2005

Le gradient de température vertical $\Gamma = \partial T / \partial z$ dans le Y grenoblois peut être évalué grâce aux stations situées sur les pentes des massifs. Dans notre étude, nous utilisons 5 stations : Saint-Hilaire-du-Touvet, Le Versoud, Peuil de Claix, Le Gua et Champagnier. Ces 5 stations ont des altitudes comprises entre 200 m et 1700 m. La figure 4-19 fournit une évaluation du gradient de vallée du 1^{er} au 15 février 2006. L'étude du gradient entre Le Gua et Saint-Hilaire du Touvet, des stations situées à 1600 m et 1700 m respectivement, montre qu'à cette altitude la stratification est neutre tout au long de la période. En dessous, les mesures montrent la présence d'une couche stable dans la vallée les 4 et 5 février. Cette couche stable est altérée par la convection le 4 février dans la journée mais seulement dans le bas de la vallée (valeurs positives du gradient $\Gamma = \partial T / \partial z$ uniquement entre le Peuil et Champagnier). La hauteur de couche limite convective (CLC) le 4 février n'a donc pas dépassé 935 m (altitude du Peuil). Du 5 au 11 février, les mesures montrent la formation d'une couche stable entre 200 et 1600 m qui est altérée chaque jour à partir de 10 h HL jusqu'à 16 h HL. D'après les mesures, le gradient devient inférieur au gradient adiabatique Γ_{humide} (cas instable) entre Champagnier et le Peuil ce qui tend à prouver que le haut de la CLC est plus élevé que le Peuil situé à 935 m d'altitude. Le gradient entre le Peuil et le Gua est légèrement inférieur au gradient adiabatique Γ_{humide} durant les mêmes périodes convectives ce qui tendrait à montrer que la CLC s'élève jusqu'à une altitude située entre 935 m (altitude du Peuil) et 1600 m (altitude du Gua). La hauteur de la CLC semble moindre les 9 et 10 février où elle atteint à peine 900 m. L'étude des gradients thermiques à partir des données des stations sol, même si elle fournit des informations qualitatives pour comparer les hauteurs de la CLC d'un jour à l'autre, reste très dépendante de la typologie des stations (nature du sol, présence d'ombre, à l'abri du vent) qui va conditionner l'échauffement plus ou moins rapide du sol. Ces effets sont particulièrement visibles durant la journée. Durant la nuit, cette méthode fournit une bonne estimation du gradient $\Gamma = \partial T / \partial z$.

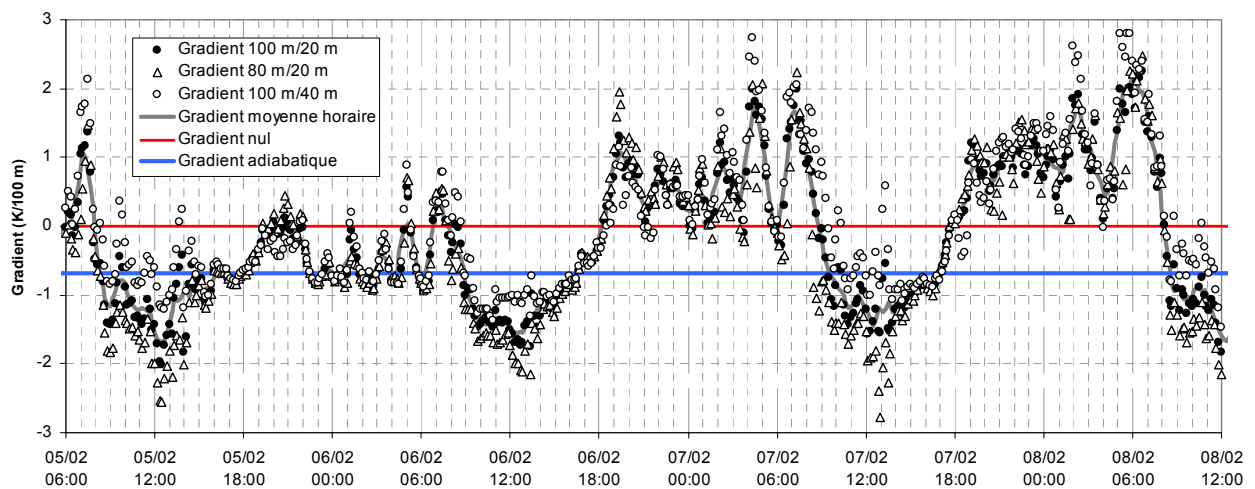


Figure 4-20. Gradient thermique vertical $\partial T / \partial z$ mesuré grâce à trois caractérisations différentes sur le mâât du CEA du 5 au 8 février 2005

Le gradient de température vertical $\Gamma = \partial T / \partial z$ au voisinage direct du sol (inférieur à 100 m) peut être calculé grâce aux mesures de température réalisées à différentes hauteurs sur le mât du CEA (figure 4-20). La figure 4-20 présente les gradients Γ calculés grâce aux mesures à différentes hauteurs à pas de temps 10 minutes ainsi que la moyenne horaire des différentes méthodes. Durant la journée, l'atmosphère est instable de 9h TU à 17h TU lorsque Γ prend des valeurs de -1,5 K/100 m, inférieures au gradient adiabatique qui vaut $\Gamma_a = -0,68$ K/100 m. Durant la nuit, l'atmosphère est stable voire très stable. Des oscillations de Γ sont observées avec une période de 1h30. La nuit du 5 au 6 février est présentée pour montrer l'impact du passage nuageux sur la stabilité de l'atmosphère. Cette nuit là, le sol se refroidit moins est l'atmosphère reste neutre durant la nuit toujours avec un effet d'oscillation. Cet effet n'est pas détecté par le modèle qui ne prend pas en compte l'impact des nuages sur la radiation IR. Les oscillations de Γ peuvent s'expliquer par un effet d'oscillation de la température créé par l'interaction entre l'îlot urbain de Grenoble et les vents descendants les pentes (catabatiques) qui modifie la température des masses d'air passant au-dessus de l'agglomération grenobloise. Des légères oscillations de la vitesse du vent sont observées la nuit et pourraient être dues à ce même phénomène. La compréhension de ce phénomène nécessiterait une étude plus poussée et des moyens expérimentaux importants permettant de documenter des profils verticaux en plusieurs localisations de la cuvette grenobloise. Un effet de mélange induit par des ondes internes générées par le relief n'est pas exclu et reste à être évalué. Une étude numérique à l'aide du code ARPS a montré que le déferlement de ces ondes par contact avec les reliefs pouvait induire un brassage de l'air de la vallée dans le cas d'une atmosphère stable et stratifiée [Tavernier, 2006]. La période des ondes était dans cette étude de 5 à 10 minutes.

4.2.3. Modélisation de l'épisode

La chaîne de modèles est utilisée dans la configuration du chapitre 2. Afin de prendre en compte la couverture neigeuse présente lors de cet épisode, l'altitude au-dessus de laquelle une couche de neige recouvre le sol a été fixée à 1000 m durant toute la période. Aucun phénomène lié à la fonte de la neige n'est pris en compte. Les paramètres de sol utilisés dans Metphomod sont fournis dans l'annexe B.2. Les polluants réglementés qui dépassent les seuils de qualité en période hivernale sont les oxydes d'azote, le benzène et les particules. Le modèle Metphomod est un modèle développé pour étudier le smog estival et n'a jamais été utilisé dans des cas hivernaux. La chimie des oxydes d'azote reste valable en hiver mais il a fallu traiter le benzène et les particules. Le benzène n'étant pas explicitement décrit par le mécanisme chimique RACM, l'approche utilisée pour ce polluant a consisté à le traiter comme une espèce chimique indépendante dans le mécanisme. Nous avons donc modifié le mécanisme RACM pour inclure une espèce BEN. La chimie et la physique des particules atmosphériques sont des sujets soumis à un nombre important de recherches et l'état de la science ne permet pas encore d'expliquer tous les phénomènes de production et de

transformation, surtout en période hivernale. Pour notre calcul, les particules sont traitées comme des traceurs passifs gazeux. La sédimentation est négligée aux échelles de temps et d'espace de notre domaine de calcul (quelques dizaines de kilomètres) et la production de particules secondaires est négligée à nos échelles. Ces deux hypothèses seront argumentées et discutées dans la suite.

Modélisation des particules en suspension

Aucun cadastre d'émission pour les particules n'est à l'heure actuelle disponible au niveau régional. Un cadastre a été alors construit à l'aide du cadastre pour les oxydes d'azote (NO_x). Les émissions surfaciques annuelles de particules $E_{PM_{10}}$ sont calculées en fonction des émissions surfaciques annuelles d'oxydes d'azote E_{NO_x} selon la relation (4.3) dans laquelle le coefficient a_e dépend de la classe SNAP de la source surfacique. Les valeurs de a_e en fonction de la classe SNAP sont données dans le tableau 4-2.

$$E_{PM_{10}} = a_e \times E_{NO_x} \quad (4.3)$$

Tableau 4-2. Rapports des émissions de PM₁₀ sur les émissions de NO₂ selon la classe SNAP d'ordre 1 en France (données EMEP 2002 sauf pour la classe SNAP 2)

Classe SNAP d'ordre 1	Description	Rapport a_e $E_{PM_{10}}/E_{NO_2}$
01	Combustion dans l'industrie	0.
02	Combustion chaudières non industrielles	0,3
03	Combustion dans l'industrie manufacturière	0,175
04	Procédés industriels	0.
05	Extraction et distribution de combustibles fossiles	0.
06	Utilisation de solvants	0.
07	Trafic routier	0,12
08	Autres machines	0,09
09	Traitements des déchets	14
10	Agriculture	1.0

Ces coefficients ont été déterminés en utilisant le cadastre EMEP pour l'année 2002 pour la France et en calculant le rapport moyen des émissions annuelles de PM₁₀ sur les émissions de NO_x. Pour la SNAP 2, le coefficient déterminé à partir du cadastre EMEP était 1,8. Cette valeur semble trop élevée pour la région urbaine de Grenoble. En effet, ce coefficient lié au chauffage prend en compte des modes de chauffage qui émettent beaucoup de particules comme le chauffage au charbon ou au bois, or la majorité du chauffage urbain est à base de chaudières à gaz, de chaudières électriques et de chauffage collectif alimenté par des

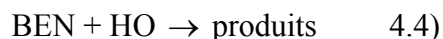
installations, comme l'usine de la Poterne à Grenoble, équipées de filtres à particules. Pour la SNAP 2, le rapport a_e a été arbitrairement fixé à 0,3. Ce rapport varie beaucoup en fonction du type d'habitat, il sera plus élevé en région rurale où le mode de chauffage utilise des combustibles dégageant des particules (bois, charbon) et où les chaudières ne sont pas équipées de dispositifs de filtrage de particules. Cela est particulièrement vrai dans des vallées comme Chamonix où le chauffage au bois a été pointé comme un gros émetteur de particules [Jaffrezo, 2005]. Pour la SNAP 10 (agriculture), le rapport a_e a été fixé arbitrairement à 1 faute d'informations précises. Pour notre calcul, les grandes sources ponctuelles (industries) n'émettent pas de particules.

Conditions aux bords pour les particules en suspension

Nous ne disposons pas pour cet épisode de conditions de bords réalistes pour les particules. Une solution serait d'utiliser les concentrations de PREV'AIR à grande échelle. Pour nos simulations, nous avons utilisé une autre approche. De 0 à 2000 m d'altitude, les concentrations en particules aux bords du modèle sur un niveau vertical donné sont fixées à la moyenne des concentrations en particules sur le même niveau dans tout le modèle. Au-dessus de 2000 m d'altitude, la concentration aux bords de Metphomod est prise nulle. La hauteur de 2000 m est arbitraire mais représente la hauteur maximum de la CLA pour cet épisode. Cette condition aux limites fait l'hypothèse que les régions à l'extérieur du domaine ont des concentrations qui varient selon la verticale comme le profil vertical moyen en particules dans le domaine. Cette hypothèse pose évidemment des problèmes avec le relief puisque les niveaux verticaux du modèle sont définis par rapport à un niveau de référence et ne le sont pas par rapport au sol. Cette condition pose également des problèmes lorsque les masses d'air changent rapidement. Le fait d'utiliser cette condition aux limites tend à pomper les particules au sein du domaine et à faire augmenter de manière irréaliste les concentrations. Le fait de limiter la hauteur de validité de cette condition de bords à 2000 m d'altitude permet de créer un mélange de l'air de la CLA riche en particules avec de l'air de la troposphère libre pauvre en particules. Ce mélange va diluer les particules en régime instable et les concentrations dans la CLA pourront diminuer de cette manière.

Modélisation de la chimie du benzène

Le mécanisme chimique RACM est modifié pour décrire la chimie du benzène avec les radicaux HO•. Afin de prendre en compte le benzène dans le mécanisme chimique RACM, ce dernier a été modifié. Le benzène apparaît dans le mécanisme comme l'espèce BEN qui réagit avec l'espèce radicalaire HO pour former les mêmes produits de dégradation que le toluène. Dans le mécanisme original, le benzène et le toluène appartiennent à l'espèce TOL [Stockwell, Kirchner, Kuhn, and Seefeld, 1997]. La réaction ajoutée au mécanisme est (4.4).



La constante de réaction k_a est calculée en fonction de température T grâce à la loi d'Arrhenius pour une réaction d'ordre 2 (4.5) avec les constantes $k_0 = 4,56 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3/\text{s}/\text{mol}$ et $E_a = 4398 \text{ J/mol/g}$ [Atkinson, 1986].

$$k_a(T) = k_0 \exp(-E_a/RT) \quad (4.5)$$

Le toluène réagit avec les radicaux HO• selon une réaction d'ordre 2 identique à celle décrite pour le toluène. La constante de cette réaction s'exprime selon la température avec (4.5) mais avec les constantes $k_0 = 1,26 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ et $E_a = -2677 \text{ J mol}^{-1} \text{ g}^{-1}$ [Atkinson, 1986]. La valeur de E_a indique que le toluène est moins réactif à haute température qu'à basse température alors que pour le benzène, c'est l'inverse. Dans les conditions de température rencontrées dans la troposphère, le benzène est moins réactif que le toluène. A 20°C, la constante de réaction k_a du benzène vaut $7,5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ alors que celle du toluène vaut $3,8 \cdot 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ mol}^{-1}$. Le rapport des constantes de réaction vaut 7 à -10°C et 5 à 20°C. En hiver, par des températures basses, à émissions, disponibilité de radicaux HO• et conditions de dispersion égales, on s'attendra à avoir un rapport benzène sur toluène plus élevé qu'en été. La déposition sèche du benzène est prise identique à celle de l'ozone pour nos calculs (voir la partie 2.3 pour le calcul de la déposition sèche).

Le mécanisme MELCHIOR2 utilisé dans CHIMERE regroupe les hydrocarbures aromatiques dans l'espèce OXYL. L'étude de la période du 1^{er} au 15 février 2005 au site des Frênes a permis de déterminer un coefficient de proportionnalité à appliquer à OXYL pour avoir accès à une concentration en benzène à partir de la concentration en espèce OXYL (4.6).

$$\text{BEN} = 0.17 \times \text{OXYL} \quad (4.6)$$

Ce coefficient n'a aucune raison d'être constant au cours d'une année et ne sera pas utilisé en dehors de la période de modélisation.

A l'émission d'une source automobile, le rapport benzène sur toluène vaut en France en moyenne 0,43 et le rapport benzène sur benzène + toluène (BT) vaut en moyenne 0,31 (tableau 4-3). D'après les mesures de COV dans l'air à Champagnier lors de la quinzaine de canicule d'août 2003, ce rapport évolue entre 0,1 durant la nuit et des valeurs de 0,3 à 0,35 durant la journée. La moyenne de ce rapport sur tout l'été 2003 (juin à septembre) est de 0,15 à Champagnier. La différence jour/nuit s'explique par deux raisons : la principale est le fait que par régime stable, la pollution est plus locale, ce qui conduit à des concentrations d'aromatiques autres que le benzène plus importantes. Ensuite les températures plus faibles la nuit jouent en faveur d'un rapport BEN/TOL plus faible et a fortiori sur un rapport BEN/OXYL plus faible. L'étude de la valeur du rapport BEN/BT au site de Grenoble les Frênes sur l'ensemble de l'année 2005 permet de déterminer un rapport moyen BEN/BT de

0,4. Ce rapport sera utilisé aux frontières de Metphomod pour calculer une concentration de benzène à partir de la concentration en OXYL. Cela revient à faire l'hypothèse qu'aux frontières de Metphomod, à distance des sources, seuls le toluène et le benzène forment l'espèce OXYL. Comme cité plus haut, étant donné la croissance de la réactivité du benzène avec la température contrairement aux autres aromatiques, le rapport BEN/BT est plus faible en été qu'en hiver. Une étude plus approfondie de la variabilité annuelle de ce rapport serait utile afin de disposer d'un forçage de qualité aux frontières de Metphomod tout au long de l'année. Cette valeur de 0,4 du rapport BEN/OXYL prise aux frontières de Metphomod est caractéristique d'une atmosphère bien mélangée à relative distance des sources de pollution.

Tableau 4-3. Emissions du parc automobile moyen français (source CCFA, 2004)

Composé	% massique des émissions du parc roulant	Composé	% massique des émissions du parc roulant
éthane	1,53	n-hexane	0,45
éthylène	13,54	méthylcyclopentène	0,00
propane	0,10	benzène	5,72
propène	5,63	cyclohexane	0,00
acétylène	5,41	3-méthylhexane	0,91
isobutane	0,54	2-méthylhexane	0,87
n-butane	1,48	trichloroéthylène	0,00
trans-2-butène	0,65	isooctane	0,53
1-butène	1,32	n-heptane	0,75
isobutène	2,36	méthylcyclohexane	0,27
cis-2-butène	0,51	234 triméthylpentane	0,21
isopentane	6,68	toluène	13,26
n-pentane	1,50	2 méthylheptane	0,00
1,3-butadiène	2,06	n-octane	0,42
3-méthyl-1-butène	0,00	tétrachloroéthylène	0,00
cyclopentène	0,00	éthylbenzène	2,67
trans-2-pentène	0,67	m + p-xylènes	7,80
1-pentène	0,51	styrène	1,20
2-méthyl-1-butène	0,73	o-xylène	3,07
cis-2-pentène	0,38	nonane	0,20
2,2-diméthylbutane	4,25	3-éthyltoluène	2,30
isoprène	0,34	4-éthyltoluène	1,00
2,3-diméthylbutane	0,64	1,3,5-triméthylbenzène	0,95
2-méthylpentane	1,53	1,2,4-triméthylbenzène	3,38
3-méthylpentane	0,44	décane	0,31
1-hexène	0,08	1,2,3-triméthylbenzène	0,84

4.2.4. Validation du calcul de la dynamique atmosphérique

Nous disposons de peu de données pour valider le calcul dynamique sur le domaine de Metphomod de la figure 3-2. La validation est basée sur les données collectées automatiquement aux stations sol pour la température, l'humidité et le vent. Le mât du CEA fournit des données à plusieurs altitudes. La comparaison des sorties de Metphomod pour la température avec les données du mât du CEA montre que le modèle décrit correctement les variations de températures journalières (figure 4-21). Le modèle a tendance à sous estimer les températures maximales de 2 K, surtout lors de la deuxième semaine de l'épisode. Cela est dû

sans doute au fait qu'après une semaine de temps ensoleillé, le sol s'est asséché, ce qui a eu tendance à amplifier le cycle diurne de la température.

Le système de vent de vallée est bien assez bien décrit par le modèle comme le montre la figure 4-22. Les directions du vent de vallée montant en journée (355°) et descendant la nuit (185°) calculées sont en bon accord avec les mesures. Le modèle tend néanmoins à décrire la bascule de vent trop tôt dans la matinée. Au Pont-de-Claix, les bascules de vent sont observées vers 9 h et 15 h HL. Les vitesses calculées par le modèle sont du même ordre de grandeur que les mesures (figure 4-23) mais les variations temporelles sont difficilement comparables. De nombreuses mesures sont comprises entre 0 et 2 m s^{-1} et dans ces conditions de vents faibles, il est délicat de comparer les vitesses calculées par le modèle aux mesures. Cependant les mesures réalisées au Pont-de-Claix montre que la vitesse maximum journalière du vent de vallée ne dépasse jamais 3 m s^{-1} quelque soit la journée (pour la période anticyclonique du 4 au 11 février).

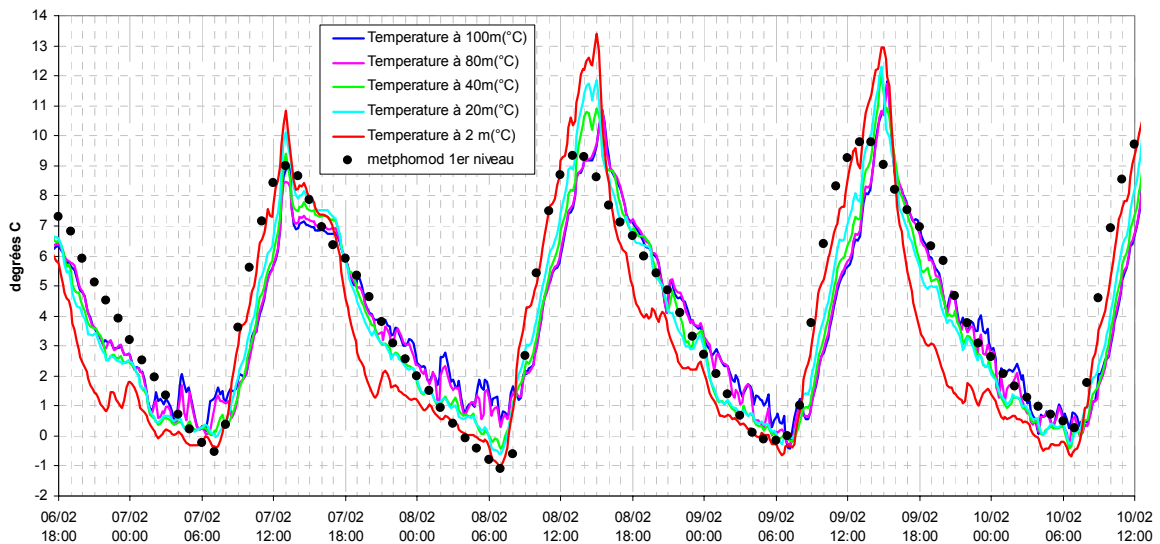


Figure 4-21. Températures mesurées à différentes altitudes au mât du CEA et simulées au premier niveau du modèle Metphomod du 6 au 10 février 2005

Le modèle tend à amplifier le développement du vent de vallée puisque les vitesses simulées peuvent atteindre 5 m s^{-1} . La vitesse maximale simulée par le modèle dépend fortement de la journée et certaines journées sont mieux simulées que d'autres. Le modèle est en bon accord avec les mesures de vitesse de vent les 4, 5 et 8 février. Pour ces journées, les vitesses de vent simulées sont proches des mesures (par exemple le 8 février sur les figures 4-22 et 4-23). Le 9 février est une journée particulière puisque le vent de vallée au Pont-de-Claix ne se développe pas d'une manière normale. La vitesse mesurée de 10 h à 16 h HL est inférieure à 1 m s^{-1} le vent est globalement de direction sud (inverse à la direction du vent de vallée montant) bien que la mesure à 10 h HL indique une direction de nord (dans la direction du vent de vallée

montant). La journée du 9 février était une journée voilée où la radiation globale au sol à Champagnier n'a pas dépassé 435 W m^{-2} , contre 490 W m^{-2} les autres journées. Un voile nuageux apparaissant à partir de 12 h HL a certainement limité la convection et le développement du vent de vallée. Cette journée montre que la bascule de vent est très sensible à la radiation solaire puisque une radiation de 300 W m^{-2} à 14 h HL semble insuffisante pour développer le vent de vallée. Des effets d'interaction avec le vent synoptique ont pu également limiter le développement du vent de vallée.

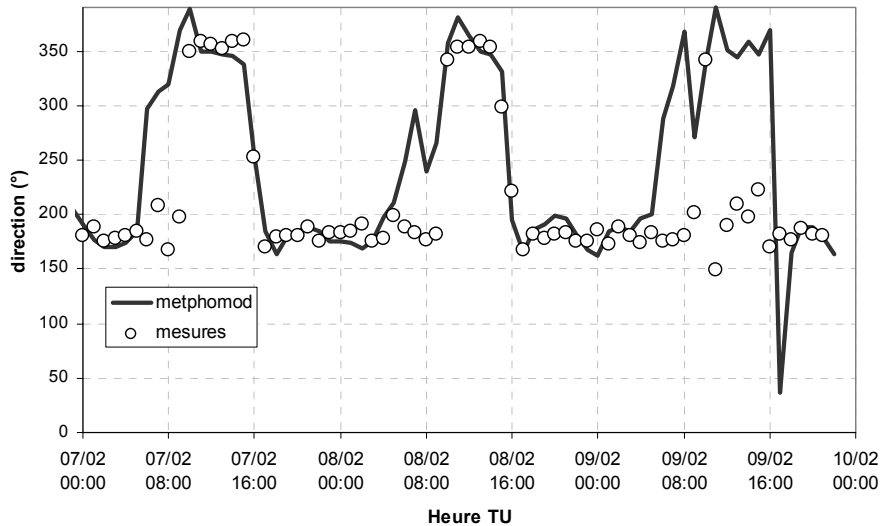


Figure 4-22. Direction du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix les 7 et 8 février 2005

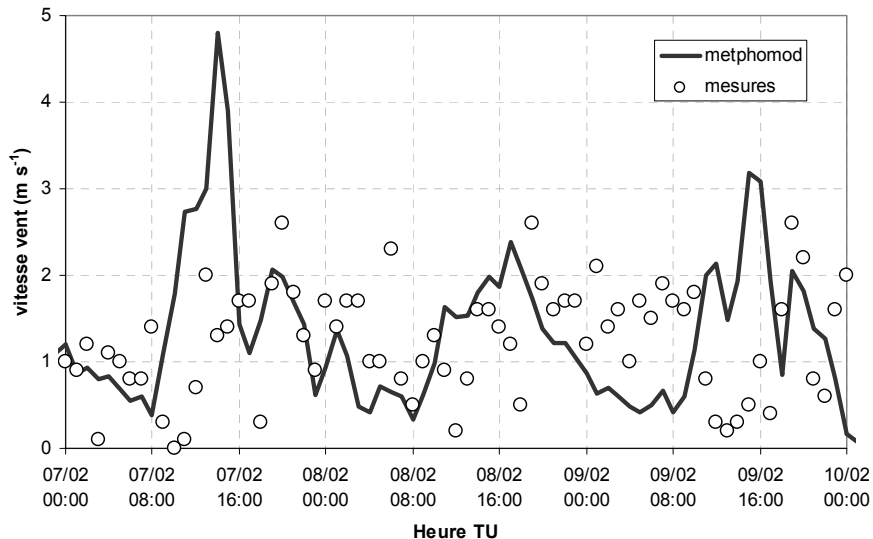


Figure 4-23. Vitesse du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix les 7 et 8 février 2005

Au mât du CEA, le cycle diurne du vent de vallée est bien décrit en ce qui concerne la direction du vent et les heures des bascules. Les vitesses du vent simulées sont du même ordre de grandeur que les mesures ($1 \text{ à } 2 \text{ m s}^{-1}$), par contre la vitesse du vent nocturne est sous-

estimée. Les mesures au mât fournissent des vitesses nocturnes au maximum de 3 m s^{-1} à 10 m et 8 m s^{-1} à 100 m (figure 4-18) alors que le modèle se limite à des vitesses de 1 à 2 m s^{-1} à 25 m du sol. Cette différence importante pourrait s'expliquer par un effet de canalisation au niveau du mât qui est mal reproduit par le modèle du fait d'une résolution spatiale insuffisante.

La bonne description du cycle diurne du vent de vallée et de la hauteur de la couche stable encourage l'utilisation de ce calcul de la dynamique pour simuler la chimie réactive et la dispersion de traceurs. Pour une étude des phénomènes de mélange nous utiliserons deux journées caractéristiques bien simulées par le modèle : les 5 et 8 février 2006. Le 5 février, le vent à 750 hPa était de sud-ouest alors que le 8 février, il était de nord-est. L'étude de ces deux journées permettra de savoir si le vent en altitude joue un rôle dans le transport et le mélange des polluants.

Cycle journalier du benzène

La comparaison des concentrations en benzène mesurées et simulées à la station de Grenoble les Frênes présente une bonne description des variations temporelles. Sur la figure 4-24, les maximums journaliers sont sous-estimés par le modèle par contre les minimums sont assez bien décrits. Deux minimums journaliers sont généralement observés : un nocturne et un diurne. Le minimum nocturne est dû à des émissions faibles durant la nuit. Malgré la couche stable au niveau du sol, le benzène ne s'accumule pas dans la couche de surface, il est dispersé par le vent ou déposé au sol. Le minimum nocturne est atteint entre 4 h et 5 h HL. Lorsque l'activité humaine augmente et que la couche stable est encore présente, on observe une accumulation du benzène. Le maximum de concentration est obtenu entre 9 h et 10 h HL. Ensuite, avec la mise en place de l'activité convective, la couche stable au-dessus du sol est détruite et le benzène se mélange quasi uniformément selon toute la hauteur de la couche de mélange convective (CLC). La hauteur maximum atteinte par la CLC, les émissions et la déposition sèche au sol du benzène vont fixer la concentration minimale au niveau du sol. Cette concentration est assez bien déterminée par le modèle autour de 14 h et 15 h HL. Avec la diminution de l'activité convective due à la diminution de l'ensoleillement, une couche stable va se former au sol. Avec la disparition du soleil derrière les reliefs, l'effet d'ombrage doit anticiper la formation de cette couche par rapport à un terrain avec une topographie plate. A cause d'émissions encore importantes à l'heure où cette couche stable se forme, le benzène commence à s'accumuler et un maximum de concentration est observé entre 19 h et 21 h HL selon la journée. Le week-end, à cause d'une circulation plus importante en soirée, le maximum du soir est plus important que le maximum du matin, les autres jours de la semaine, le maximum matinal est plus important que le maximum en soirée.

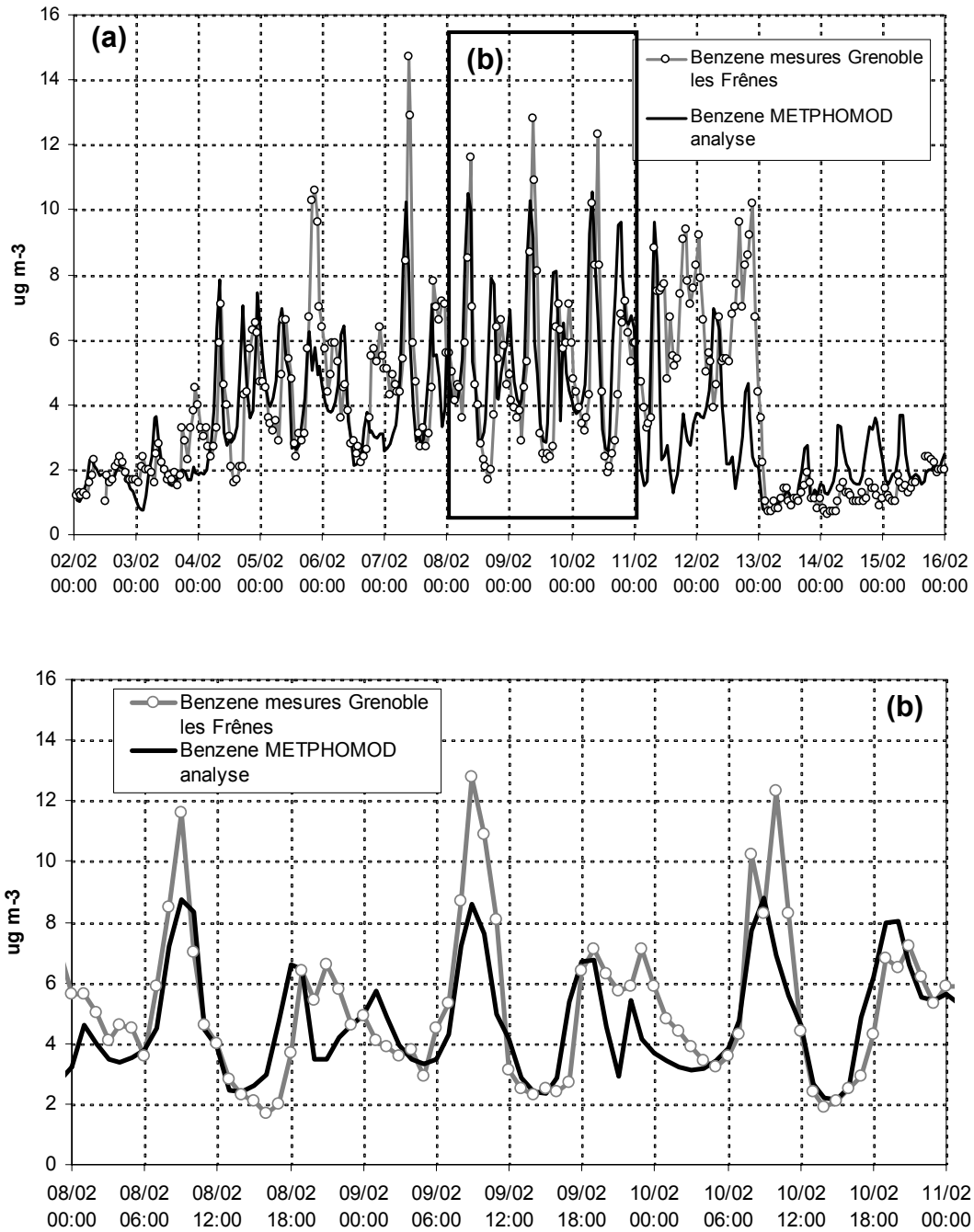


Figure 4-24. Benzène mesuré à la station de Grenoble les Frênes (courbe grise et points) et simulé dans le premier niveau du modèle (courbe noire) du 2 au 15 février 2005 (a) et les 8, 9 et 10 février 2005 (b)

Cycle journalier des PM_{10}

Le cycle journalier des PM_{10} dans l'agglomération grenobloise est assez semblable à celui du benzène. Les deux causes principales sont que les sources mobiles (essentiellement le trafic automobile) et le chauffage sont les principaux émetteurs et que le temps de vie des particules et celui du benzène sont du même ordre de grandeur (quelques jours). La figure 4-25 montre

l'évolution des concentrations en PM₁₀ à la station de Grenoble les Frênes. Comme pour le benzène, les pics du matin et du soir sont bien visibles. Le modèle décrit bien les variations journalières de PM₁₀ durant toute la période du 4 au 12 février. L'amplitude des pics de PM₁₀ est très bien reproduite la plupart des jours, en particulier le matin, ce qui tend à prouver que le modèle décrit bien la formation de la couche limite convective (CLC) le matin. Le soir, le modèle détecte moins bien les variations temporelles des concentrations, malgré une bonne amplitude. La mauvaise détection du pic du samedi 5 février dans la soirée est due à des émissions trop faibles dans le modèle. Le 5 février était le premier jour des vacances de février pour la zone B. Durant ces départs de vacances, la rocade sud et l'autoroute A51 longeant le Drac sont très souvent bloquées dès le début de matinée et jusqu'en soirée. Cela explique la montée plus rapide des concentrations dans la journée et un pic à 87 µg m⁻³ à 22 h HL.

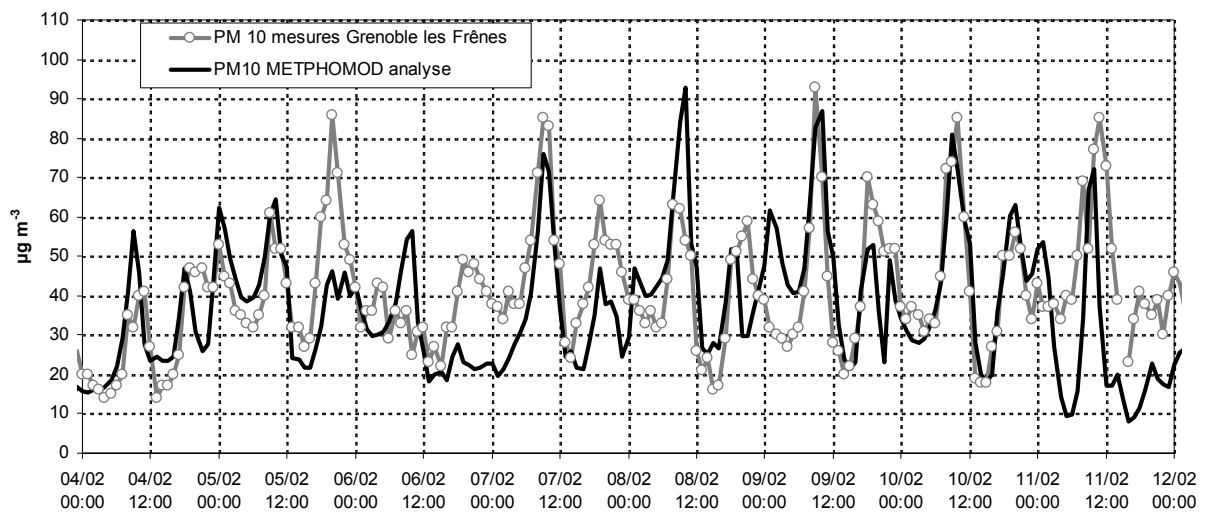


Figure 4-25. PM₁₀ mesuré à la station de Grenoble les Frênes en moyenne horaire (points et courbe grise) et simulé dans le premier niveau du modèle à chaque heure (courbe noire) du 4 au 11 février 2005

Dans la nuit du 5 au 6 février, un passage nuageux sur le sud de l'agglomération associé à du vent de sud a déstabilisé l'atmosphère et aucun pic n'est observé le 6 au matin. Le dimanche 6 février au soir, le modèle a sous estimé les concentrations, ce qui a tendance à montrer que le trafic automobile réel était plus important que celui figurant dans le cadastre. Ce manque d'émissions de PM₁₀ (et donc de NO_x) est certainement imputé aux retours de week-end importants ou les descentes de stations de ski après le bel après-midi ensoleillé du 6 février. Les moyennes journalières simulées par le modèle sont plus ou moins en bon accord avec les mesures selon les journées (figure 4-26). Le modèle tend à sous-estimer les moyennes journalières le 5, 6 et 7 février ainsi que le 11 février. La surestimation du 11 février est certainement due à la méthode de forçage des concentrations en traceur PM₁₀ aux bords qui tend à ne pas réagir assez vite à un changement de masse d'air. En effet, le 11 février, les particules sont rapidement dissipées sous l'effet d'une masse d'air instable, ce que le modèle

reproduit mal. Il est difficile de tirer une conclusion sur les résultats des autres journées car la moyenne journalière est une valeur influencée par de nombreux facteurs. On émet néanmoins l'hypothèse que les journées du 5, 6 et 7 février ont pu recevoir un apport à longue distance de particules. Cette hypothèse se justifie par le fait que le régime de vent à 750 hPa était de sud du 5 au 7 février alors qu'il était de nord le reste de la période (figure 4-16).

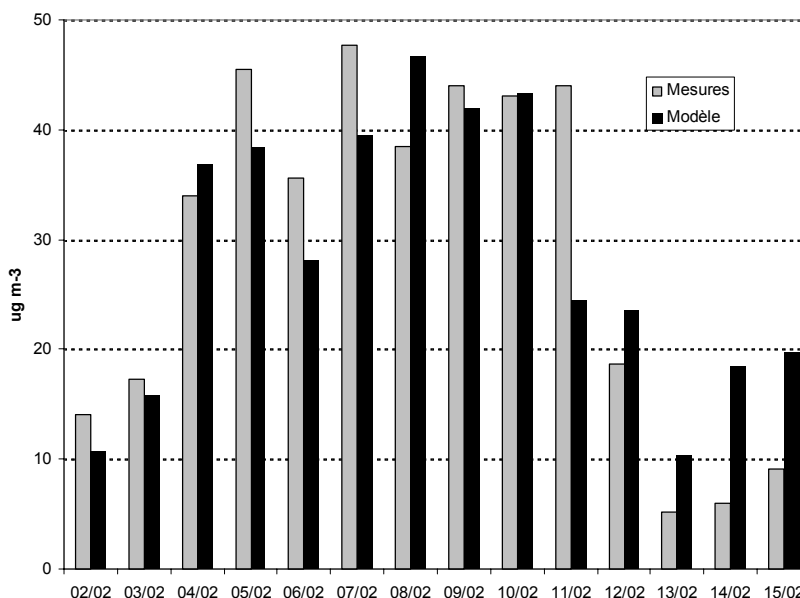


Figure 4-26. PM_{10} en moyenne journalière mesuré à la station de Grenoble les Frênes (gris) et simulé dans le premier niveau du modèle (noir) du 2 au 15 février 2005

Discussion sur la simulation des PM_{10}

L'étude du rapport de concentration $PM_{2.5}/PM_{10}$ à la station de Grenoble les Frênes de la figure 4-27 fait apparaître des variations importantes de ce rapport durant la période. Le rapport a deux composantes : une composante principale qui varie à une échelle de temps de quelques jours et une composante secondaire qui varie autour de la composante principale avec une période journalière. Durant la nuit, le rapport prend des valeurs plus élevées que durant la nuit. Ces variations diurnes sont causées par des phénomènes divers liés à la chimie hétérogène des particules, la présence d'humidité ou le dépôt sec. Pour ce qui est du dépôt sec, les particules les plus grosses ont tendance à sédimenter plus vite ce qui pourrait expliquer que les particules mesurées durant la nuit au niveau de la canne de prélèvement de la station des Frênes appartiennent à la fraction fine. La composante principale présente également de fortes variations au long de la période. Ces variations sont visibles sur la figure 4-26 en calculant la moyenne 24 h du rapport. Du 2 au 7 février, cette composante vaut 0,8 alors que durant la journée du 7, il descend à une valeur de 0,6. Après le 11, avec le retour d'un temps perturbé, le rapport remonte à 0,9. Les chutes de neige à partir du 13 février vont perturber la mesure par TEOM et rendre les mesures difficilement utilisables. En effet, les

précipitations induisent des biais de mesure comme pointé par le programme POVA ([Aymoz, 2005], p.133). La mesure par TEOM induit également un biais dans la mesure de certains composés qui sont facilement volatils. Le principe de la mesure impose le chauffage de l'aérosol à une température de 50°C, or à cette température, de nombreux composés sont vaporisés et une perte de masse est observée. Ceci est particulièrement vrai pour les nitrates qu'on rencontre en hiver après une longue période de temps stable comme l'ont montré Allen et al. [1997].

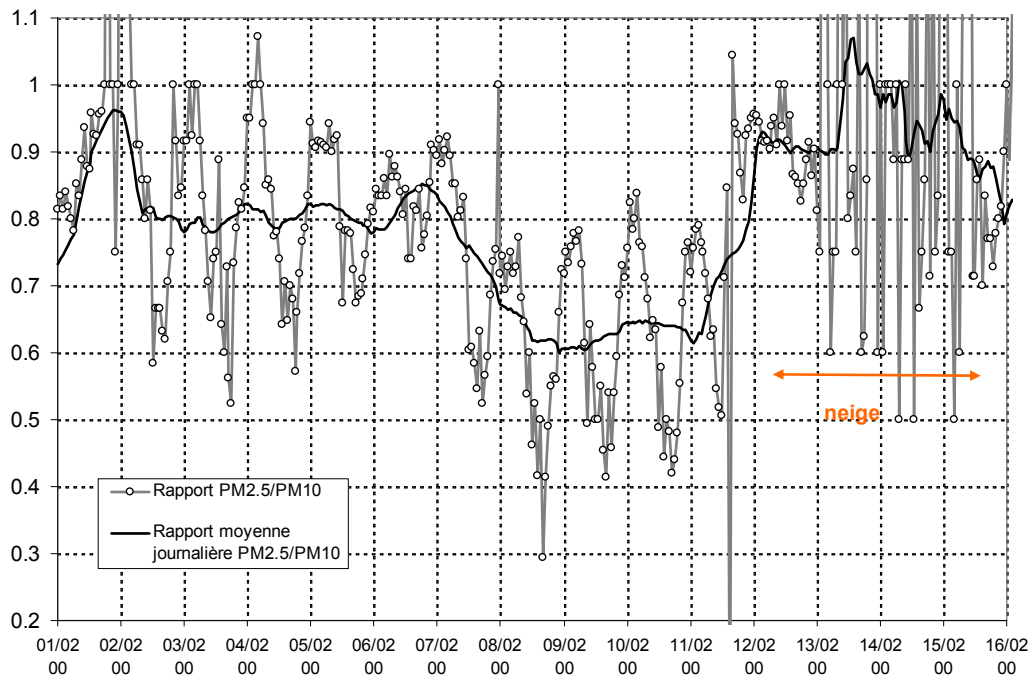


Figure 4-27. Rapport PM_{2.5}/PM₁₀ mesuré à la station de Grenoble les Frênes en moyenne horaire (points et courbe grise) et en moyenne glissante sur 24 heures (courbe noire)

Les changements de masse d'air interviennent de manière notable sur le rapport PM_{2.5}/PM₁₀ et la rapide baisse du rapport lors de la journée du 7 février pourrait être due à un changement de composition de la masse d'air puisque le 7 février le vent à 750 hPa passe du sud à l'ouest puis au nord est. Ce changement de composition intervient lors de la mise en place du vent de vallée lorsque la vallée est influencée par la masse d'air venant du nord par la cluse de Voreppe. La variabilité du rapport PM_{2.5}/PM₁₀ tend à montrer que les masses d'air synoptiques ont un impact sur les concentrations de PM₁₀ mesurées à Grenoble. La couche de l'atmosphère située en dessous de l'altitude de 750 hPa semble jouer un rôle important dans les concentrations de fond en PM₁₀ dans l'agglomération grenobloise. Cette altitude est caractéristique de la hauteur de la circulation régionale créée par la vallée du Rhône. Des simulations à l'aide de la version de CHIMERE traitant de la chimie des aérosols sur le domaine de la région Rhône-Alpes de la figure 2-7 apporteraient certainement des indications sur l'impact respectif des masses d'air régionales et synoptiques sur les concentrations de PM₁₀ à Grenoble.

4.2.5. Mécanismes de mélange vertical dans le Y grenoblois en hiver

L'épisode de février 2005 est caractéristique d'un épisode hivernal faisant intervenir deux types d'inversions thermiques. Une première inversion grande échelle qui va mettre un couvercle au-dessus de la vallée durant une bonne partie ou totalité de la journée et une inversion locale créée par le sol qui va disparaître durant la journée grâce au mélange convectif au sein de la couche limite convective (CLC). Dans la suite nous illustrons les interactions entre ces deux inversions à l'aide des simulations numériques. Puisque aucune mesure en trois dimensions n'est disponible durant cet épisode, seul le modèle permet d'étudier les circulations dans les vallées. La figure 4-28 montre l'évolution du profil de température potentielle virtuelle θ_{virt} au-dessus du centre de Grenoble pour la journée du 8 février 2005. On remarque sur le profil de 4 h HL que l'atmosphère est très stratifiée durant la nuit. On ne distingue pas de couche résiduelle mais plusieurs inflexions sur le profil montrent la présence de couches faiblement stables ($\partial\theta_{virt}/\partial z$ positif proche de 0) séparées par des couches très stables ($\partial\theta_{virt}/\partial z$ très positif). Les couches faiblement stables sont présentes de 400 m à 600 m et vers 1000 m. A 12 h HL, avec le réchauffement du sol, une forte instabilité au sol apparaît alors que le reste du profil est stable ou quasi neutre. A 14 h HL, la CLC est bien développée jusqu'à environ 1400 m. Ce résultat est en accord avec la hauteur de couche de mélange évaluée dans la partie 4.2.2 à partir des gradients verticaux entre le Peuil et le Gua (figure 4-19).

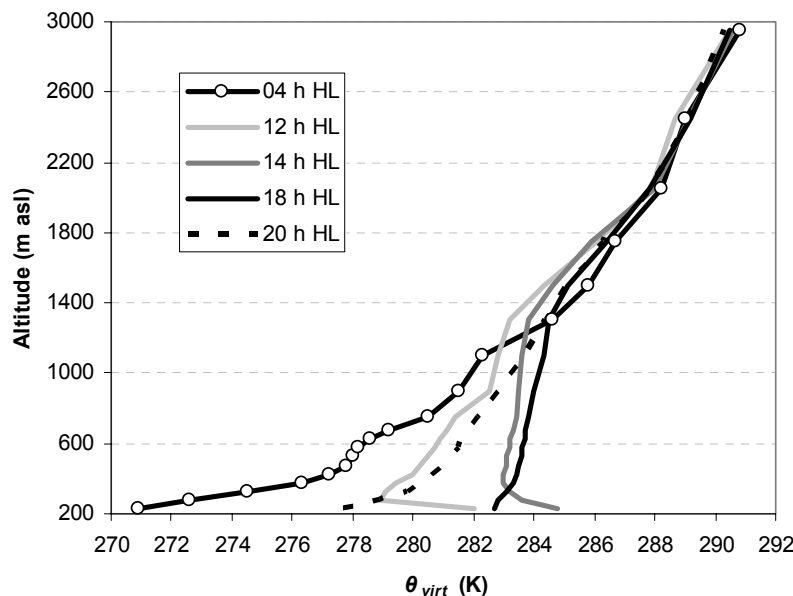


Figure 4-28. Evolution de θ_{virt} au cours de la journée du 8 février à la verticale du centre de Grenoble

Tout au long de la journée, de 1400 m à 2000 m, l'atmosphère est très stable. Cette couche stable est responsable du couvercle sur la cuvette grenobloise. Tant que la CLC ne se

développe pas à une hauteur égale au sommet de la couche stable, les polluants restent piégés sous cette couche stable. De manière générale, la présence des reliefs à une altitude qui est supérieure à l'altitude à laquelle se développe la CLC conduit à l'accumulation des polluants dans la vallée. L'impact du mélange dans la CLC et de la présence de l'inversion sur les profils du traceur PM₁₀ de Metphomod est bien visible sur la figure 4-29. Dans la couche de surface, les concentrations en PM₁₀ augmentent rapidement durant la matinée avec l'augmentation de l'activité dans l'agglomération grenobloise. Lorsque le mélange se met en place entre 12 h et 14 h HL, les concentrations dans la couche de surface diminuent et les concentrations dans la CLC s'homogénéisent. Sur le profil de 14 h HL, on observe une couche vers 1500 m où les concentrations en PM₁₀ sont plus importantes. Ces particules ont été transportées en altitude par des vents de pente sur la face sud du massif de la Chartreuse par les thermiques se développant tôt le matin sur les pentes. Arrivés dans la couche stable vers 1500 m, les thermiques sont stoppés et les particules s'accumulent dans cette couche stable. Par régime synoptique de nord-est, les particules initialement présentes au sud de la Chartreuse (nord de l'agglomération) sont ensuite transportées au sud de l'agglomération. On détaillera plus loin ce mécanisme. Au-dessus de 2000 m, les concentrations en particules sont faibles et caractéristiques de la troposphère libre.

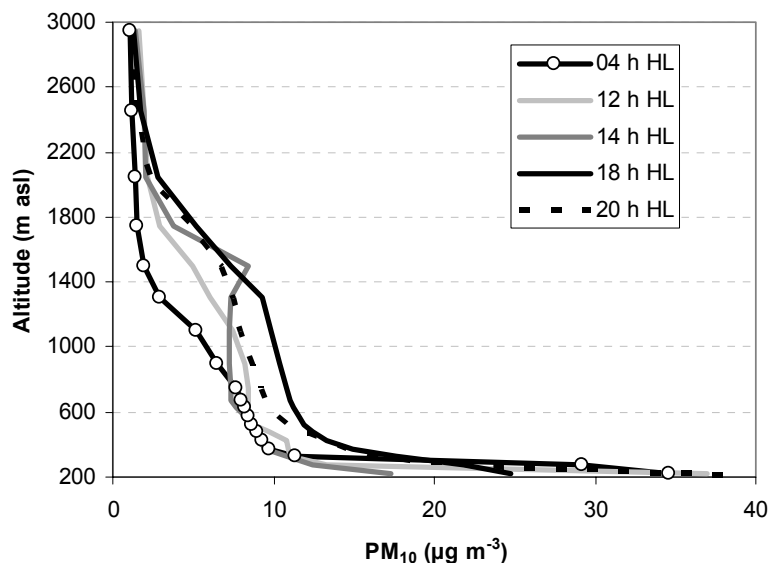


Figure 4-29. Evolution de la teneur en PM₁₀ au cours de la journée du 8 février à la verticale du centre de Grenoble

Les hypothèses faites plus haut sur l'impact du régime de vent en dessous de 750 hPa sur la composition en taille des particules en suspension poussent à vérifier sur les simulations quel est l'impact de ce régime de vent sur la hauteur de mélange et le vent de vallée. La figure 4-22 montre que le vent de vallée se développe au Pont-de-Claix tous les jours du 4 au 11 février sauf le 9 février où le vent est tournant à cause d'un voile nuageux l'après-midi. Afin d'étudier les phénomènes de mélange et de transport, nous étudions deux journées pour

lesquelles la description du système du vent de vallée par le modèle est correcte en vitesse et en direction (selon la comparaison avec les stations sol présentée plus haut) : les 5 et 8 février 2005. Les 5 et 8 février 2005 sont deux journées bien ensoleillées (la radiation globale mesurée à la station de Champagnier atteint respectivement 477 et 497 $W m^{-2}$) et sans développement nuageux. Le vent à 750 hPa était de sud le 5 alors que le 8, il était d'ouest tournant en cours de journée au nord-est. La simulation fait apparaître que les processus qui gouvernent le transport et le mélange des polluants du 2 au 11 février 2005 sont très semblables de ceux décrits pour la période de canicule malgré un développement de la CLC plus limité en hiver.

Journée du 5 février 2005 : CLC piégée

La coupe de la figure 4-30 montre que le 5 février 2005 est une journée avec un régime de CLC piégée par analogie avec la simulation sur la canicule de 2003. Vers 12 h HL, les légers thermiques générés au-dessus de l'agglomération grenobloise entraînent les polluants en altitude, principalement sur les versants sud qui ne sont pas enneigés (mouvement correspondant à la flèche blanche sur la figure 4- 30a). A partir de 14 h HL, le vent de vallée se développe au sein de la cuvette grenobloise et entre en contact avec le léger vent de sud sur le plateau du Trièves. Au point de contact, appelée zone de front de vent de vallée dans la partie 4.1, l'air provenant de Grenoble est soit détourné latéralement, soit amené en altitude vers 2000 m (figure 4- 30b).

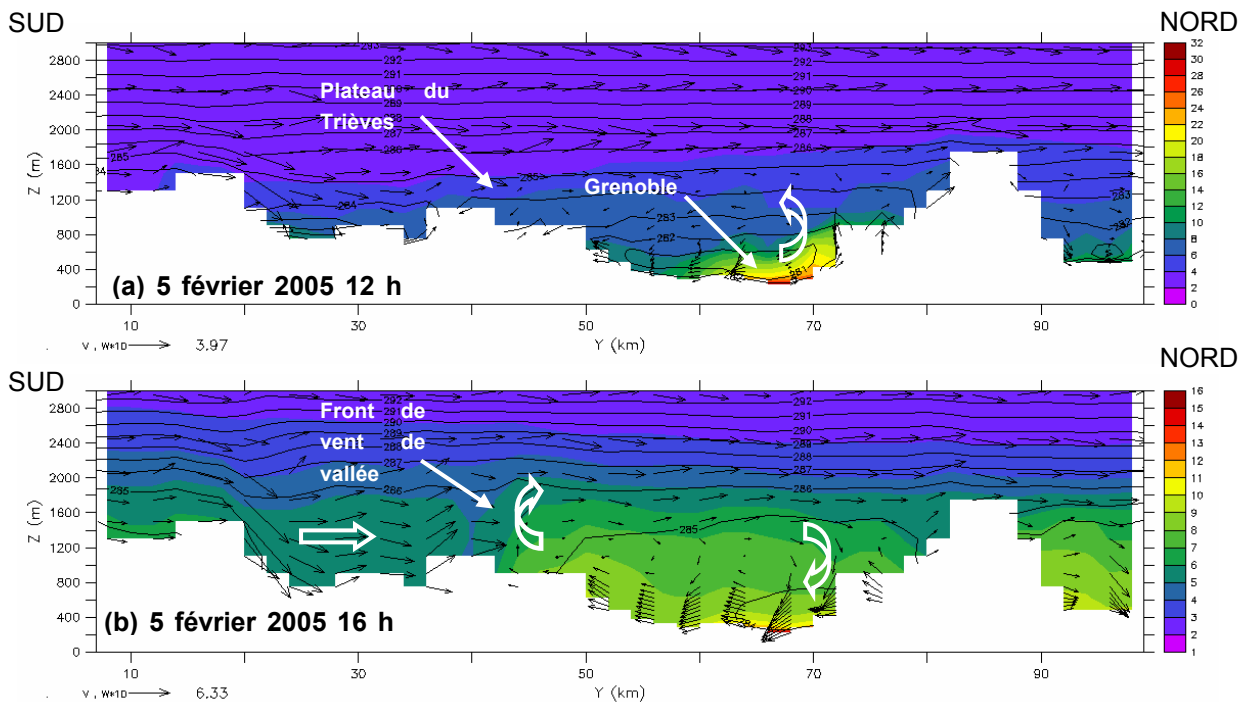


Figure 4-30. 5 février 2005 : coupe S-N passant au centre du Y grenoblois (en UTM 31, $x = 615$ km) avec les concentrations en $\mu g m^{-3}$ du traceur PM_{10} et les isocontours en K de θ_{virt} . Les vecteurs vents (v, w) sont représentés avec un facteur 10 pour le vent vertical w

La coupe sur l'horizontale à 1300 m d'altitude de la figure 4-31 montre bien la présence de particules à proximité des pentes des massifs montagneux à 16 h HL. Ces particules émises dans le fond de la cuvette grenobloise sont transportées à 1300 m d'altitude par les vents de pente qui se développent au cours de l'après-midi. Ces particules sont ensuite transportées vers le sud jusqu'à la zone de front de vent de vallée où elles rejoignent le vent de sud vers 1600 m. A 20 h HL, avec l'arrêt du vent de vallée montant, les particules émises par l'agglomération durant la journée sont transportées vers le nord. On remarque sur la coupe à l'horizontale à 1300 m d'altitude de la figure 4-31 la présence d'une zone de forts gradients correspondant à l'emplacement du front de vent de vallée à 16 h HL. A 20 h HL, avec la disparition du vent thermique, cette zone de forts gradients est transportée vers le nord dans la couche de vent de sud.

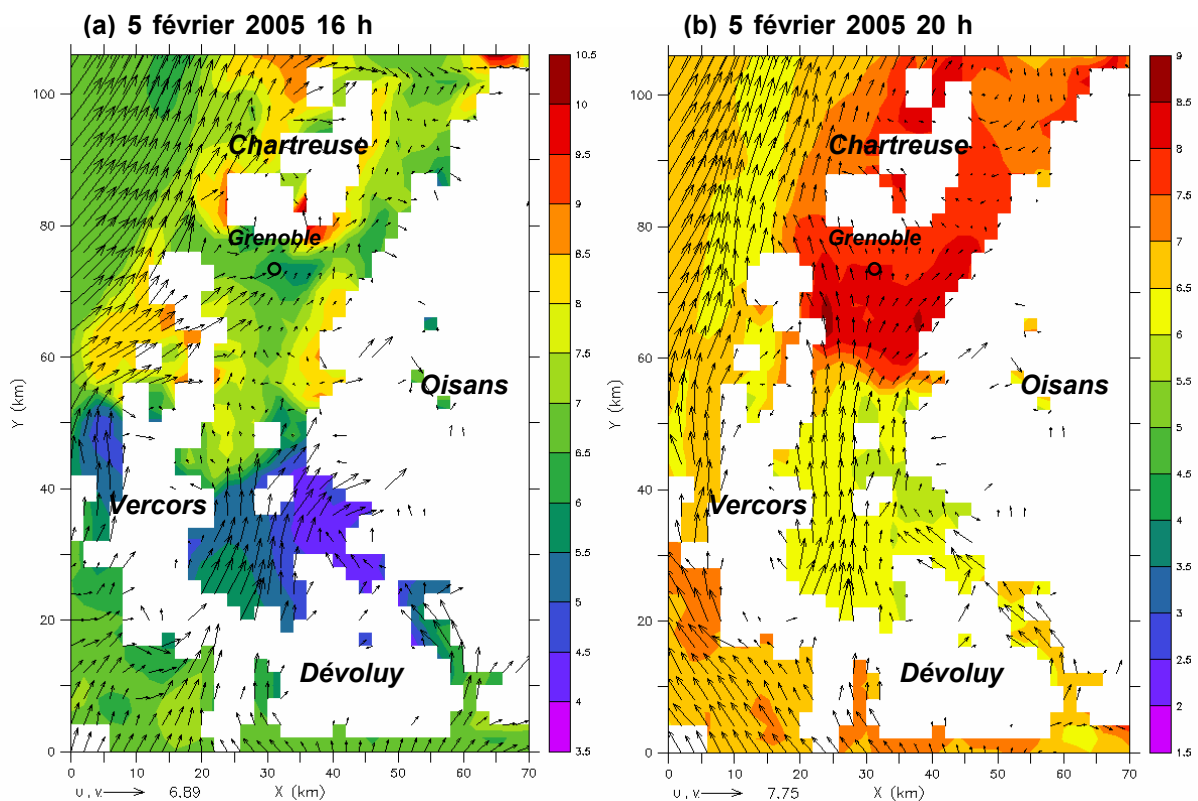


Figure 4-31. 5 février 2005 : régime de sud ouest. Concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} simulées par le modèle dans un plan horizontal à 1300 m asl avec les vecteurs vent (u, v)

Journée du 8 février 2005 : CLC libre

La coupe de la figure 4-32 montre que le 8 février 2005 est une journée à régime de CLC libre. Comme pour le 5 février, vers 12 h HL, les légers thermiques générés au-dessus de l'agglomération grenobloise entraînent les polluants en altitude (mouvement correspondant à la flèche blanche sur la figure 4-32a). A partir de 14 h HL, le vent de vallée se développe au sein de la cuvette grenobloise et converge avec le vent à 750 hPa quelque part au-dessus du

plateau du Trièves (figure 4-32b). Le vent synoptique ayant la même direction que le vent de vallée, il y a une accélération du vent de vallée à la convergence des deux écoulements. Les vitesses dans les écoulements sont très faibles par rapport aux vitesses fournies par les simulations de période estivale. La vitesse caractéristique du vent de vallée est de 7 m s^{-1} en été pour le régime de CLC libre. En période hivernale, les vitesses de vent de vallée sont de l'ordre de 2 m s^{-1} .

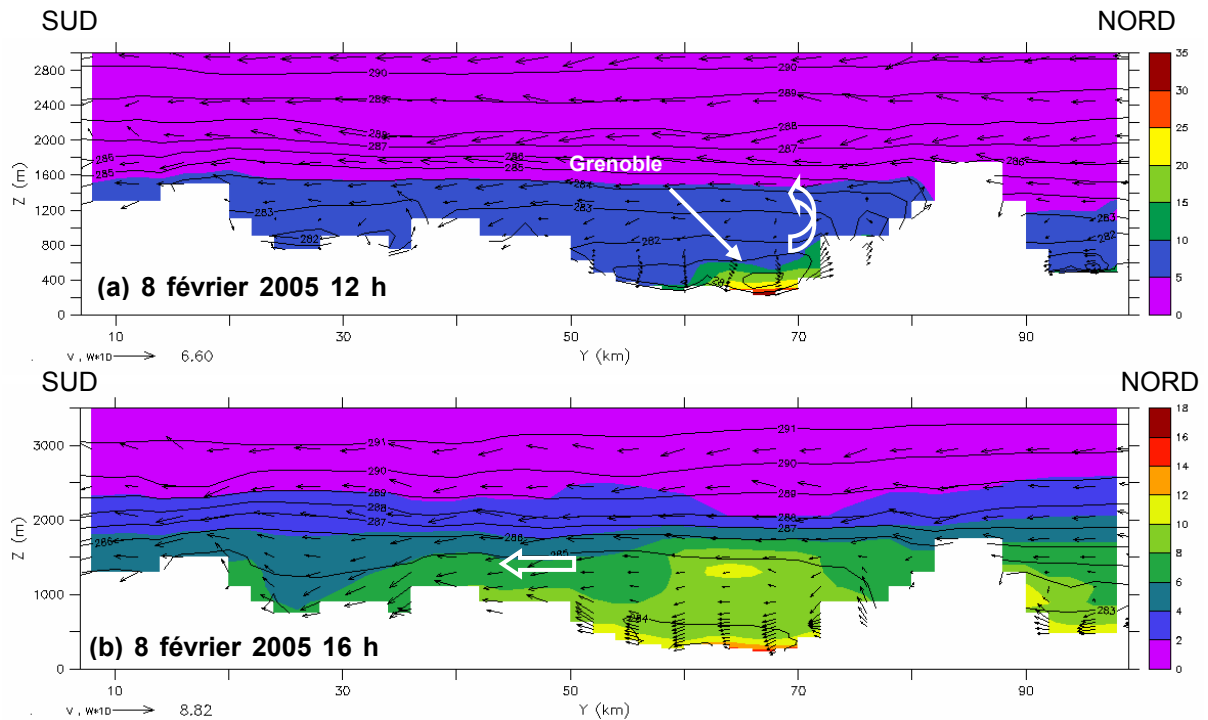


Figure 4-32. 8 février 2005 : coupe S-N passant au centre du Y grenoblois (en UTM 31, $x = 615 \text{ km}$) avec les concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} et les isocontours en K de θ_{virt} . Les vecteurs vents (v, w) sont représenté avec un facteur 10 pour le vent vertical w

La coupe sur l'horizontale à 1300 m d'altitude de la figure 4-33 montre bien la présence de particules au-dessus de Grenoble à 16 h HL (4-33a) élevées par la convection au sein de la CLC urbaine et le transport de ces particules vers le sud à 20 h HL (4-33b). Sur les simulations, le vent de nord est canalisé dans les vallées du Y grenoblois et rejoint le vent de vallée au sud du Y. On remarque également que si pendant la journée du 8 février, la circulation dans le Grésivaudan et la vallée du Drac est couplée avec la circulation dans la plaine iséroise, ce n'est pas le cas pendant la nuit. La cluse de Voreppe se comporte comme une vanne ouverte durant la journée en régime de vent de vallée montant et fermée pendant la nuit en régime de vent de vallée descendant. La circulation nocturne dans la cluse de Voreppe décrite au début de cette partie à l'aide des données du mât du CEA semble être une circulation de basses couches (quelques centaines de mètres) dans laquelle la vitesse est élevée à cause de la canalisation par le relief.

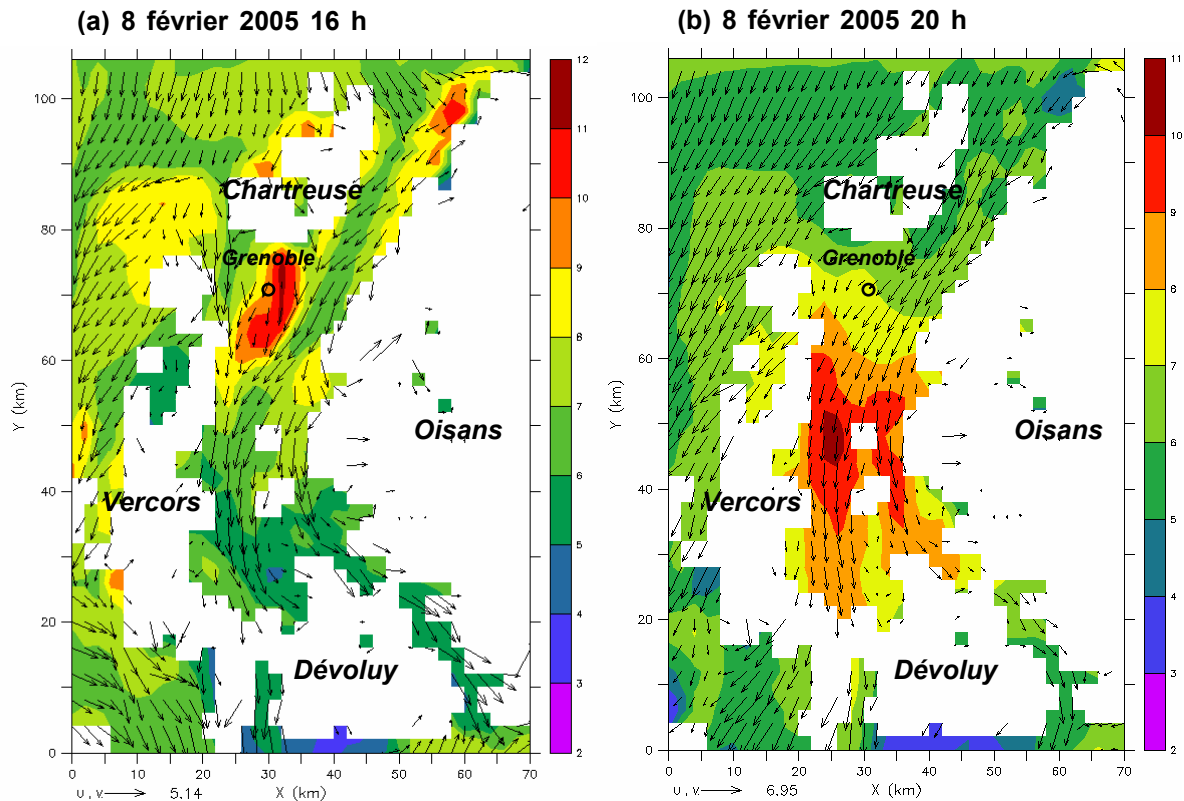


Figure 4-33. 8 février 2005 : régime de nord est. Concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} simulées par le modèle dans un plan horizontal à 1300 m asl avec les vecteurs vent (u, v)

Le modèle Metphomod fournit une estimation de la hauteur de la CLC (le calcul est décrit dans la partie 2.3). Cette estimation n'est pas très représentative sur les pentes mais au centre du Y grenoblois, qui est un terrain plat, cette estimation permet de savoir jusqu'à quelle altitude le mélange se réalise. D'après les observations que les randonneurs font aisément en allant se balader en montagne l'hiver, cette « couche » de mélange ne suit pas le relief mais est horizontale comme le montre la photo de la figure 4-15. Les modèles numériques comme MM5 utilisant un maillage *terrain following* ou assimilé fournissent des hauteurs de mélange qui ont tendance à suivre la pente. La formulation des équations de transport et de diffusion le long des pentes induit une dispersion numérique selon la verticale vraie comme on l'a montré dans la partie 2.7. Metphomod présente l'avantage d'utiliser un maillage cartésien qui va permettre de mieux décrire des cas stratifiés comme ceux observés en hiver. En contrepartie, comme évoqué dans le chapitre 2, ce maillage permet une moins bonne description des gradients près du sol dans les zones en altitude.

La figure 4-34 montre l'évolution de la CLC et du vent au sol lors de la journée du 8 février 2005. Les paramètres qui contrôlent le développement de la CLC sont l'orientation des pentes et la nature du sol. Dans la simulation, le sol est couvert de neige au-dessus de 1000 m et le développement de la CLC au-dessus de cette altitude est très limité à cause de l'albédo appliqué au sol qui est de 0,7.

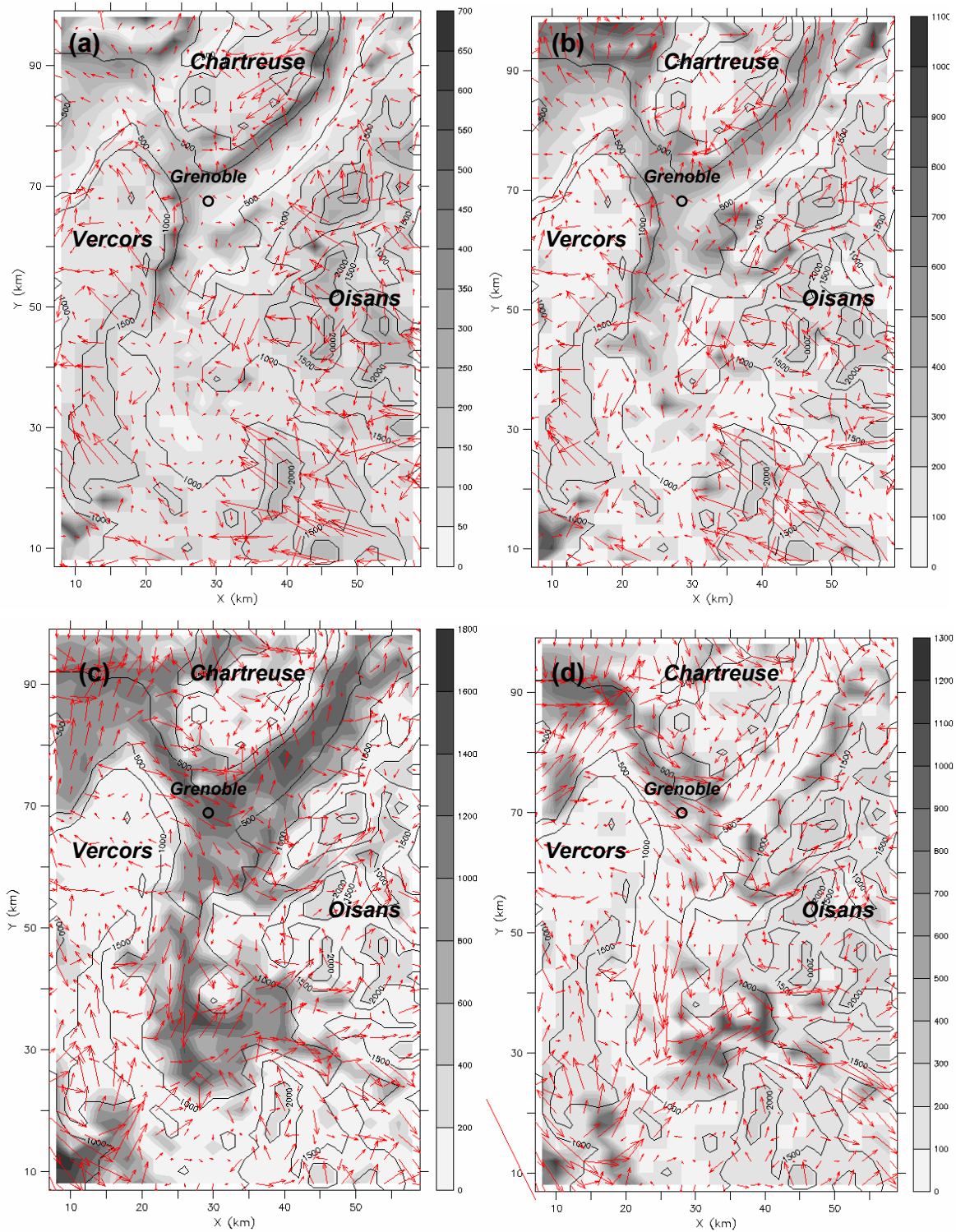


Figure 4-34. Hauteur en mètres de la CLC diagnostiquée par Metphomod le 8 février 2005 à 10 h (a), 11 h (b), 15 h (c) et 16 h (d) HL dans la région grenobloise avec les vecteurs vents associés

A 10 h HL, une activité convective se développe sur les pentes orientées à l'est (Vercors) et au sud-est (Chartreuse) et la hauteur de la CLC atteint des valeurs de 500 m alors qu'au centre de la vallée, la CLC ne s'est pas encore développée (4-34a). A 11 h HL, la CLC se développe dans le centre de la cuvette (4-34b). A 15 h, la CLC est développée de manière homogène

dans les différentes vallées du Y jusqu'à une altitude de 1400 m au-dessus du sol. Sur les massifs montagneux du Vercors, de la Chartreuse et de l'Oisans, la hauteur de la CLC est de quelques centaines de mètres (4-34c). A 16 h HL, seuls les versants orientés à l'ouest reçoivent encore directement la radiation solaire et la hauteur de CLC sur ces versants est de quelques centaines de mètres (4-34d). Partout ailleurs, la CLC a disparu au profit de la couche de surface stable.

4.2.6. Conclusion sur la modélisation de l'épisode de février 2005

La modélisation de cet épisode de 15 jours de février 2005 a mis en lumière les processus de transport et de mélange d'espèces gazeuses passives dans la région de Grenoble. La pollution par les particules PM_{10} et le benzène apparaît avoir une composante locale importante. La détermination exacte des parts respectives de la production d'aérosol secondaire, de l'apport de l'extérieur du domaine et des émissions locales est délicate avec les simulations présentées plus haut mais il semble que l'aérosol primaire soit responsable d'une grande part de la PM_{10} à Grenoble lors d'épisodes de pollution d'une durée typique de la semaine. Les variations du rapport $PM_{2.5}/PM_{10}$ provenant des mesures TEOM semblent néanmoins indiquer que des processus externes à la vallée jouent un rôle non négligeable sur la composition de l'aérosol. Lors de l'épisode étudié, les particules émises par le trafic et le chauffage urbain vont être mélangées jusqu'à une altitude de 1400 m puis transportées vers le sud de l'agglomération par le léger vent thermique se développant dans la journée entre 15 h et 17 h HL. Un stockage de particules durant la nuit est décelé sur les simulations. La localisation des zones de stockage dépend fortement de la direction du vent au sein de la couche atmosphérique située au-dessus des massifs entourant Grenoble, vers 750 hPa. Des couches réservoirs de particules sont simulées certaines journées en altitude en toit de CLC, autour de 1400 m. L'interaction du faible vent de vallée soufflant en journée vers le sud avec le vent à 750 hPa crée des circulations complexes des polluants au sein de la cuvette. Toutes les conclusions tirées ici n'ont pas été validées avec une étude expérimentale en trois dimensions. Les hauteurs de CLC et les vitesses des écoulements restent à être confirmés par d'autres études.

4.2.7. Discussion : représentativité et fréquence des épisodes stables en vallée par utilisation des mesures radon et de radioactivité alpha et beta des aérosols

Le radon est le plus lourd des gaz rares, et le plus lourd des gaz à température ambiante. À température et pression standard le radon est sans couleur. La concentration de radon dans l'atmosphère terrestre est très faible mais il est considéré comme toxique pour la santé (agent du cancer du poumon). Le radon peut s'accumuler dans les espaces clos et notamment dans les maisons, surtout dans les caves mal ventilées, à cause de la désintégration du radium qui vient

lui de la désintégration de l'uranium naturellement présent dans les briques et les roches du sol. Son émission continue à la surface de la Terre et sa durée de vie assez longue lui permet d'être un bon traceur passif des émissions à la surface. Des mesures de radon sont réalisées depuis 1991 sur le site du CENG par l'APPA Dauphiné Savoie.

Dans le passé, de nombreuses études ont utilisé le radon pour caractériser la stabilité de l'atmosphère en se basant sur des mesures horaires de sa concentration. Selon la dérivée par rapport au temps des concentrations, on peut calculer un indice de stabilité [Perrino, Pietrogangelo, and Febo, 2001]. Ces études ont montré que l'indice calculé était très bien corrélé aux concentrations maximales journalières en benzène mesurées à des sites proches. Pour notre période d'étude, la mesure de radon au CENG peut être comparée avec la mesure du benzène réalisée sur le site de Grenoble les Frênes (figure 4-35). La figure 4-35 montre que les pics journaliers de benzène sont assez bien corrélés aux pics journaliers de radon. Les 5 et 6 février étant un week-end, les concentrations de benzène sont plus faibles à cause d'une circulation automobile moindre. Le radon, lui, a un flux d'émissions au sol quasi constant dans le temps. Le benzène a des variations journalières plus importantes à cause des émissions qui varient dans le temps, de la déposition sèche et de sa durée de vie légèrement inférieure à celle du radon. La mesure du radon permet d'avoir un bon aperçu des concentrations en polluants primaires sur des sites de fond de l'agglomération grenobloise. Des mesures de radon sont réalisées depuis 1991 et il est donc facile de déterminer la fréquence de périodes comme celle de février 2005 lors des 15 dernières années.

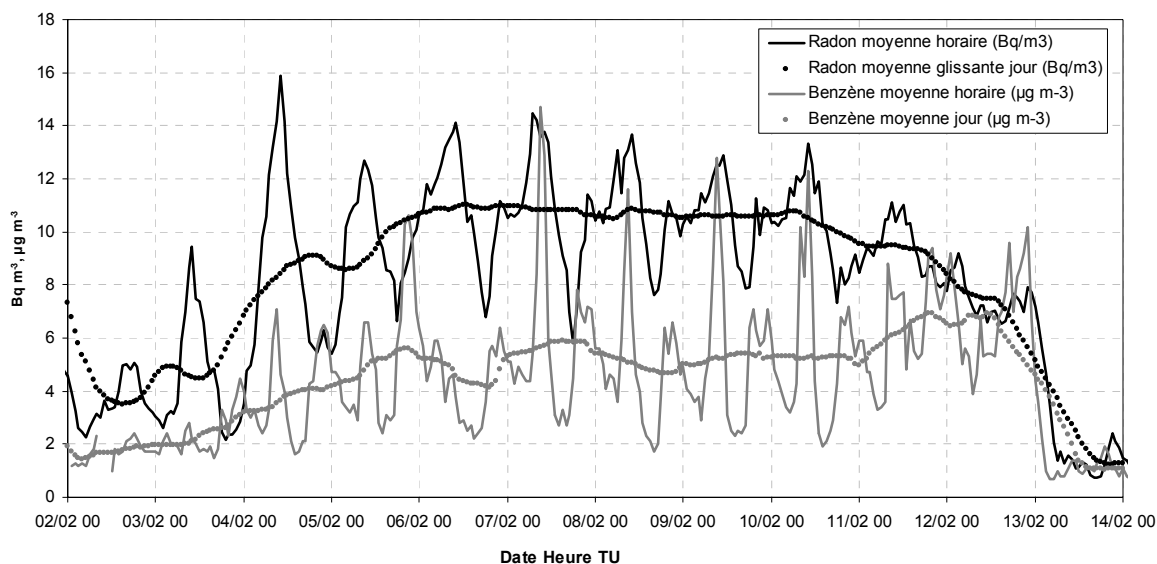


Figure 4-35. Mesures de radon réalisées sur le site du GENG et mesures de benzène réalisées sur le site des Frênes du 2 au 14 février 2005

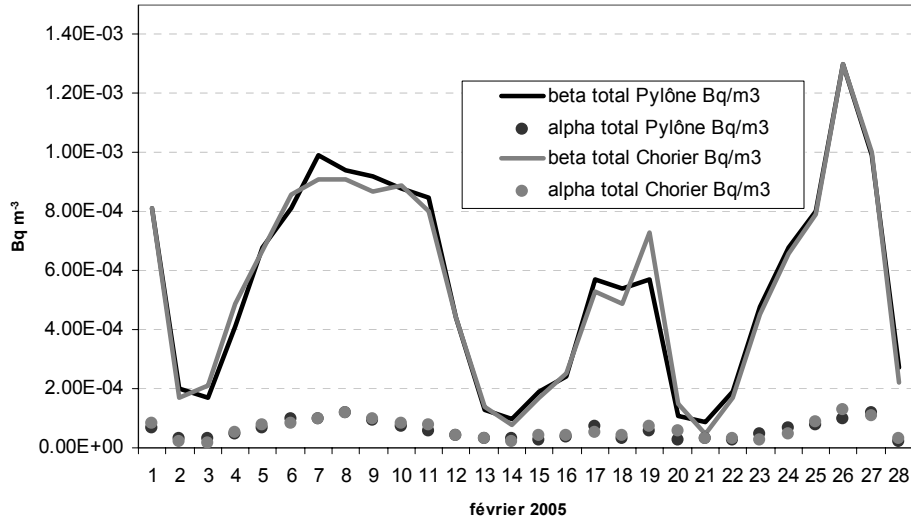


Figure 4-36. Mesures de la radioactivité des prélèvements 24 heures d'aérosol aux stations piscine Chorier et pylône réalisés sur filtre avec des échantillonneurs haut volume

De nombreuses mesures d'aérosols sont également réalisées par le CEA pour contrôler l'impact des installations utilisant des produits radioactifs sur le site du CENG. Ces mesures comprennent des mesures du rayonnement alpha et beta des aérosols prélevés avec des échantillonneurs à grand volume de pompage. Un prélèvement d'une durée de 24 heures est réalisé chaque jour sur le toit de la piscine Chorier située au centre de Grenoble et sur le site du pylône du CEA. La figure 4-36 présente les résultats pour le rayonnement alpha et beta pour le mois de février 2005. On remarque très bien sur les mesures la présence de l'inversion du 4 au 11 février. La mesure aux deux stations est bien corrélée, ce qui montre que la pollution en aérosol dans la cuvette grenobloise est une pollution assez homogène quelque soit le lieu en fond de vallée. La corrélation entre les mesures des rayonnements alpha et beta aux deux stations CEA et piscine Chorier valide l'hypothèse selon laquelle le radon est émis de manière homogène dans l'agglomération grenobloise. De plus, les conclusions sur la stabilité émises à l'aide des données du mât du CEA semblent applicables à l'agglomération.



Chapitre 5. Validation de la chaîne PREVALP par des campagnes de tubes à diffusion passive pour le benzène, le NO₂ et l’ozone dans la région Rhône-Alpes

5.1. Interpolation géostatistique et modélisation déterministe

Ces dernières années, l'interpolation géostatistique a été massivement utilisée pour cartographier les concentrations de divers polluants. Des campagnes à base de tubes à diffusion passive sont utilisées pour mesurer une valeur intégrée des concentrations sur une ou deux semaines en de nombreux sites de la région Rhône-Alpes par les AASQA [Chaxel, 2001]. La géostatistique permet d'interpoler les concentrations mesurées en ces points donnés en s'aidant de variables dites « explicatives » telles les émissions, la densité de population connues sur des grilles à pas kilométriques. Les cartes ainsi réalisées sont très détaillées (de précision kilométrique). La réalisation de plusieurs campagnes lors d'une année permet selon certaines hypothèses de calculer une moyenne annuelle de concentration. Les modèles eulériens en trois dimensions fournissent des données de concentration sur des grilles de pas fin (un à plusieurs kilomètres) et sont donc des candidats sérieux pour fournir des variables explicatives. Les données issues de modèles en trois dimensions ont déjà été utilisées comme variables explicatives [Wackernagel, Lajaunie, Blond, Roth, and Vautard, 2004]. Des résultats de campagnes par tubes à diffusion ont déjà été utilisés dans de nombreuses études pour valider un modèle de chimie transport comme au Portugal par Monteiro et al. [2005].

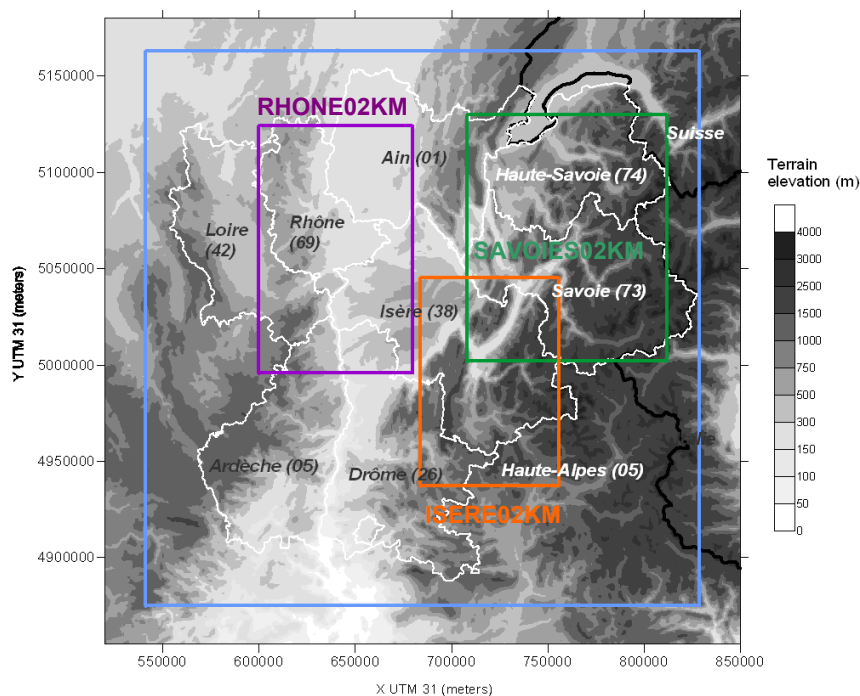


Figure 5-1. Domaines de calcul Metphomod utilisés pour valider le modèle sur la région Rhône-Alpes à l'aide des tubes à diffusion passive

Nous proposons de la même manière de valider la chaîne de modèles en utilisant les données issues de deux campagnes annuelles de tubes à diffusion passive. Il est difficile dans l'état actuel des ressources en calcul de réaliser des calculs sur des grilles à pas kilométriques pour

une année entière, par contre sur des périodes plus courtes (1 à 2 semaines), il est envisageable de faire tourner les modèles petite échelle. Dans un premier temps nous nous intéressons à une campagne de mesure du NO₂ et du benzène en 2005 puis à une campagne de mesure de l’ozone en 2002. Afin de se focaliser sur des périodes polluées de une à deux semaines, nous avons choisi une période par campagne. Pour le NO₂ et le benzène, nous avons simulé la période du 1^{er} au 16 février 2005 et pour l’ozone la période du 18 au 26 juin 2002. Ces deux périodes sont caractérisées toutes deux par des périodes anticycloniques où l’on a observé des accumulations des polluants étudiés tout au long des périodes. Pour les deux cas étudiés (hivernal et estival), la fin des périodes est caractérisée par l’arrivée de conditions météorologiques de dispersion des polluants (conditions dépressionnaires).

La chaîne de modèles décrite au chapitre 2 est utilisée avec différents domaines localisés sur la figure 5-1 pour calculer les concentrations en benzène, ozone et NO₂ au niveau du sol pour les deux périodes d’intérêt. La résolution des domaines les plus petits est 2 km sur 2 km. Cette résolution a été jugée satisfaisante d’après les tests effectués sur le cadastre des émissions par les AASQA et aucune simulation à résolution plus fine n’a été réalisée. Les sorties à pas horaire des modèles sont intégrées sur toute la durée d’exposition des tubes à diffusion passive afin de calculer une moyenne. Cette moyenne est comparée à la valeur de concentration intégrée par les tubes à diffusion passive [Pontet and Benmati, 2005].

5.2. Généralités sur les tubes à diffusion passive

L’avantage de la méthode d’étude de la pollution atmosphérique à base de tubes à diffusion passive est la grande taille de l’échantillon obtenu par rapport à une méthode avec des stations fixes. L’étude peut être réalisée sur une durée très brève et le coût est plus faible, proportionnellement au nombre de sites. Par contre la moyenne n’apporte aucune indication sur les variations temporelles des concentrations en polluants durant la période d’échantillonnage.

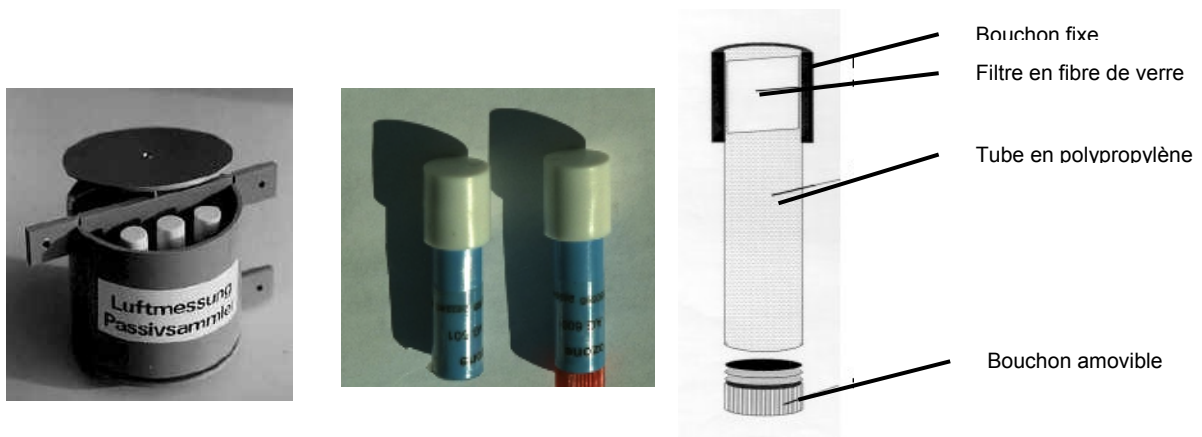


Figure 5-2. Boîte de protection, tubes à diffusion passive pour l’ozone et schéma d’un tube à diffusion passive [Chaxel, 2001]

Pour l’ozone, le phénomène physique qui conditionne la mesure est la diffusion de l’ozone dans le tube suivant la loi de Fick. Les molécules d’ozone contenues dans le tube vont se diffuser en direction du fond du tube où la concentration en ozone est plus faible, du fait de la réaction chimique qui a lieu sur le filtre. Ceux-ci sont en cellulose imbibée d'un réactif, le (1,2)-di-4-pyridiléthylène (DPE), qui va réagir avec l'ozone atmosphérique. En laboratoire, on additionne du MBTH (3-méthyl-2-benzothiazolinone hydrazone) pour produire une molécule colorée, l'azine. Après une stabilisation dans un bain d'eau chaude à 55°C pendant 40 minutes, on mesure l'absorbance de la solution à 442 nm. Si tous les tubes sont exposés durant le même temps T_{expo} , la concentration en ozone atmosphérique est déduite par formule (5.1).

$$C = b_1 \cdot A + b_0 \quad (5.1)$$

Les coefficients b_0 et b_1 sont traditionnellement obtenus grâce à la droite d'étalonnage. Les réactifs contenus dans les tubes sont sensibles à la lumière et à l'humidité. Il est donc nécessaire de placer les tubes dans des boîtes (figure 5-2) qui les protègent de la pluie et de la lumière tout en conservant une bonne aération. La température à l'intérieure de la boîte sera une température "sous abri". Chaque boîte contient au maximum six tubes. Quelques caractéristiques techniques des tubes pour l’ozone sont fournies dans le tableau 5-1.

Tableau 5-1. Caractéristiques techniques des tubes à diffusion utilisés pour l’ozone

	Ozone
Fonction d'étalonnage	PS [mabs] = 0.0255 [$\mu\text{g m}^{-3} \text{ h}$] $r = 0.83$ [Monn and Hangartner, 1990]
Précision	Déviation de 7 % par rapport à la valeur
Limite de sensibilité	3 $\mu\text{g m}^{-3}$ pour une semaine d'exposition
Interférences	Sensible à la lumière, nécessite un cache de protection
Sensibilité croisée	Possible avec des oxydants
Temps d'exposition	Limité à une semaine

Les tubes utilisés pour mesurer le NO_2 sont fournis et analysés par PASSAM, laboratoire d’analyse en Suisse. Le tube passif est constitué d’un tube inerte de propylène de 7,4 cm de long pour un diamètre de 9,5 mm. Les molécules de dioxyde d’azote migrent le long du tube jusqu’à un absorbant, la triéthanolamine. La quantité absorbée est proportionnelle à la concentration dans l’environnement. Cette quantité est extraite puis déterminée par colorimétrie à 540 nm selon la méthode de Salzman. Pour les protéger des intempéries et minimiser l’influence du vent, les tubes NO_2 sont placés dans une boîte de protection (figure 5-3).

Les tubes utilisés pour le benzène sont de marque Radiello®, ils sont analysés par la Fondation Salvatore MAUGERI, laboratoire de recherche en Italie. Ces tubes sont constitués d'une cartouche de charbon graphité de 60 mm de long et de 4,8 mm de diamètre et d'un corps diffusif. Contrairement aux tubes NO₂, la géométrie de l'échantillonneur est radiale : le parcours diffusif s'effectue de l'extérieur en direction de l'axe plutôt que le long de l'axe. Le benzène est adsorbé sur la cartouche ; après désorption thermique, il est quantifié par chromatographie. Les tubes sont protégés des intempéries par un abri de protection.

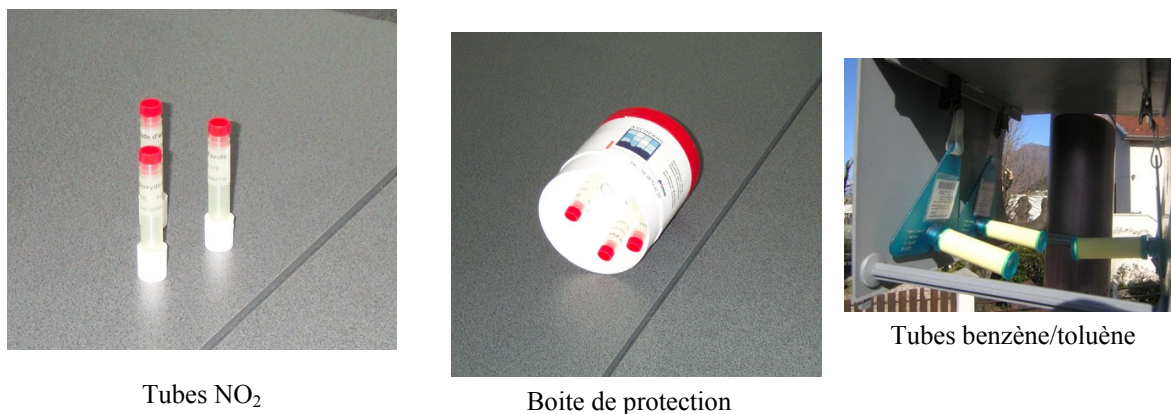


Figure 5-3. Boîte de protection, tubes à diffusion passive pour le NO₂ et le benzène [Pontet and Benmati, 2005]

5.3. Cartographie du benzène et du NO₂ du 1^{er} au 16 février 2005

Le benzène (C₆H₆) est un COV aromatique avec un seuil de détection olfactive pour des teneurs dans l'air comprises entre 1.5 et 4.7 ppm. En fonction de l'environnement, du climat et de la concentration d'autres polluants, sa durée de vie dans l'atmosphère varie de quelques heures à quelques jours. La réaction avec les radicaux hydroxyle est sa voie de dégradation la plus importante mais il peut être aussi lessivé de l'air par la pluie (légèrement soluble dans l'eau). Son facteur de conversion pour 1 ppb vaut 3.19 µg m⁻³ dans les conditions standard.

Il peut être émis lors de la synthèse chimique d'hydrocarbures aromatiques substitués (éthylbenzène, phénol, cyclohexane...) et par les fours de cokerie. Outre ces sources industrielles, le benzène est présent naturellement dans le pétrole brut et l'essence (< 1% en volume dans l'essence), les sources majeures d'émission sont les gaz d'échappement automobile (tableau 4-3) mais également l'évaporation de l'essence pendant son stockage, son transport et sa distribution. La combustion du bois et d'énergies fossiles contribue également de manière importante à l'émission de benzène.

Données expérimentales

Six campagnes d'échantillonnage de 15 jours ont eu lieu au cours de l'année 2005 (tableau 5-2). La globalité de la région Rhône-Alpes était échantillonnée comme le montre la figure 5-4.

Tableau 5-2. Dates des campagnes de mesure de l'ozone par tubes à diffusion lors de l'année 2005

	Mois	Dates de mesures
Campagne 1	Février	du 1 ^{er} au 16 février 2005
Campagne 2	Mars/avril	du 22 mars au 5 avril 2005
Campagne 3	Juin/juillet	du 21 juin au 5 juillet 2005
Campagne 4	Août	du 9 au 23 août 2005
Campagne 5	Octobre	du 4 au 18 octobre 2005
Campagne 6	Novembre/Décembre	du 29 novembre au 13 décembre 2005

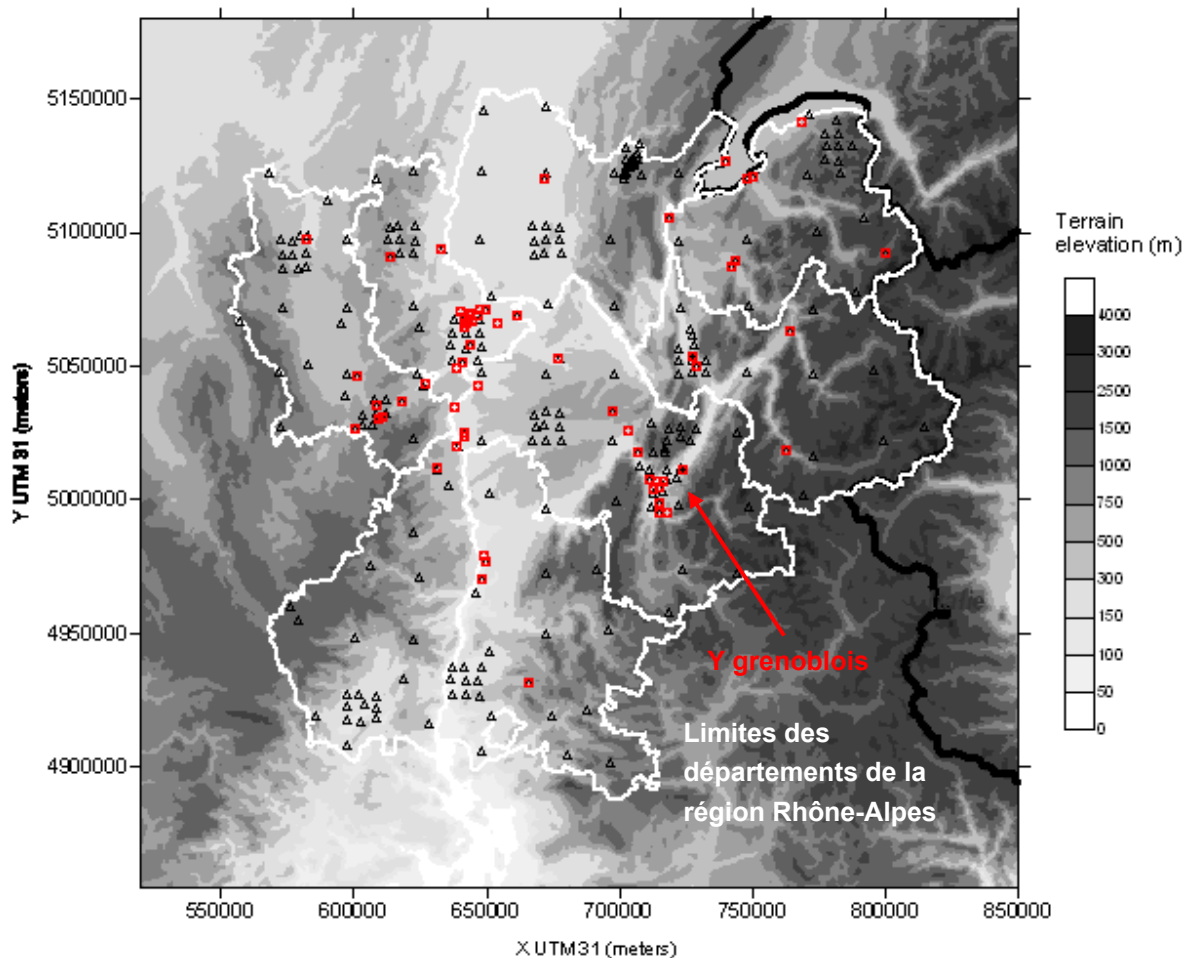


Figure 5-4. Emplacement des tubes à diffusion passive NO₂ et benzène (triangles) et des stations fixes mesurant le NO₂ (cercles)

Résultats

Les résultats des tubes à diffusion passive sont présentés et analysés en détail par le GIERSA [Pontet and Benmati, 2005] pour les différentes périodes d'échantillonnage. Si l'on considère uniquement les résultats pour la campagne 1, les concentrations moyennes en benzène sont bien corrélées aux concentrations moyennes en NO_2 pour la quinzaine du 1^{er} au 15 février 2005. La figure 5-5 montre que la corrélation vaut $r^2 = 0,73$.

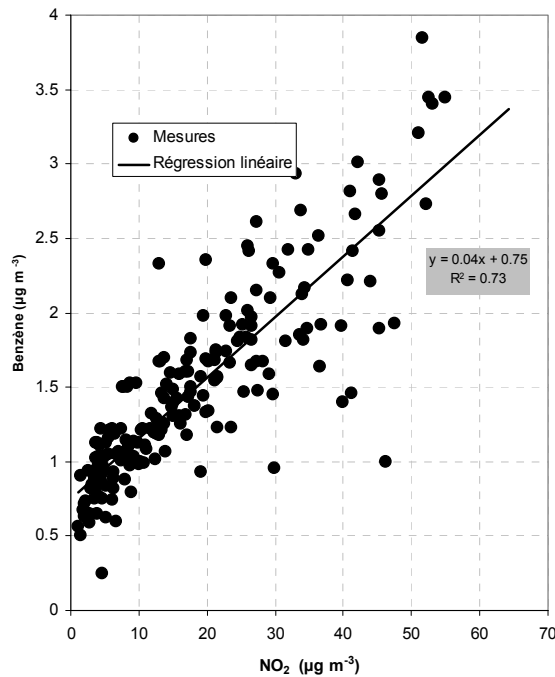


Figure 5-5. Concentrations moyennes en benzène en fonction des concentrations moyennes en NO_2 pour la quinzaine 1^{er} au 15 février 2006 mesurés par les tubes à diffusion passive dans la région Rhône-Alpes

Durant des périodes hivernales stables lors desquelles les polluants stagnent à proximité des sources, les variations temporelles de ces deux polluants sont bien corrélées. Cette corrélation est due au fait que les sources de NO_2 et de benzène sont les mêmes et sont essentiellement le trafic routier et le chauffage en période hivernale (comme il a été montré dans la partie 4.2). Cela montre que le cadastre des émissions de benzène de la région Rhône-Alpes, dont le calcul est détaillé au chapitre 2, est assez similaire à celui du NO_2 . Le rapport des émissions massiques $\text{C}_6\text{H}_6/\text{NO}_x$ en hiver est alors de 0,05. Ce résultat nécessite l'hypothèse que tous les oxydes d'azote (NO_x) se retrouvent sous forme de NO_2 dans l'atmosphère peu de temps après l'émission. Cette transformation est réalisée par la réaction $\text{NO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}_2$. A distance des sources, la chimie du NO_2 et du benzène et la déposition sèche de ces gaz jouent un rôle plus important. Dans notre modèle, les deux puits de benzène sont la réaction avec les radicaux $\text{HO}\bullet$ et la déposition sèche alors que les réactions chimiques faisant intervenir le NO_2 sont beaucoup plus nombreuses. Ainsi, à distance des sources, le rapport $\text{C}_6\text{H}_6/\text{NO}_2$ varie de manière plus importante.

Simulation Metphomod des concentrations moyennes en NO₂ et benzène

L'analyse des résultats de la simulation pour l'épisode hivernal sur le domaine ISERE02KM de la figure 5-1 est présentée dans la partie 4.2. Les concentrations moyennes en NO₂ sur les deux semaines de la période d'échantillonnage calculées par le modèle sont comparées aux données des tubes passifs sur la figure 5-6 pour chacun des trois domaines de calcul de la figure 5-1 : ISERE02KM, SAVOIES02KM et RHONE02KM.

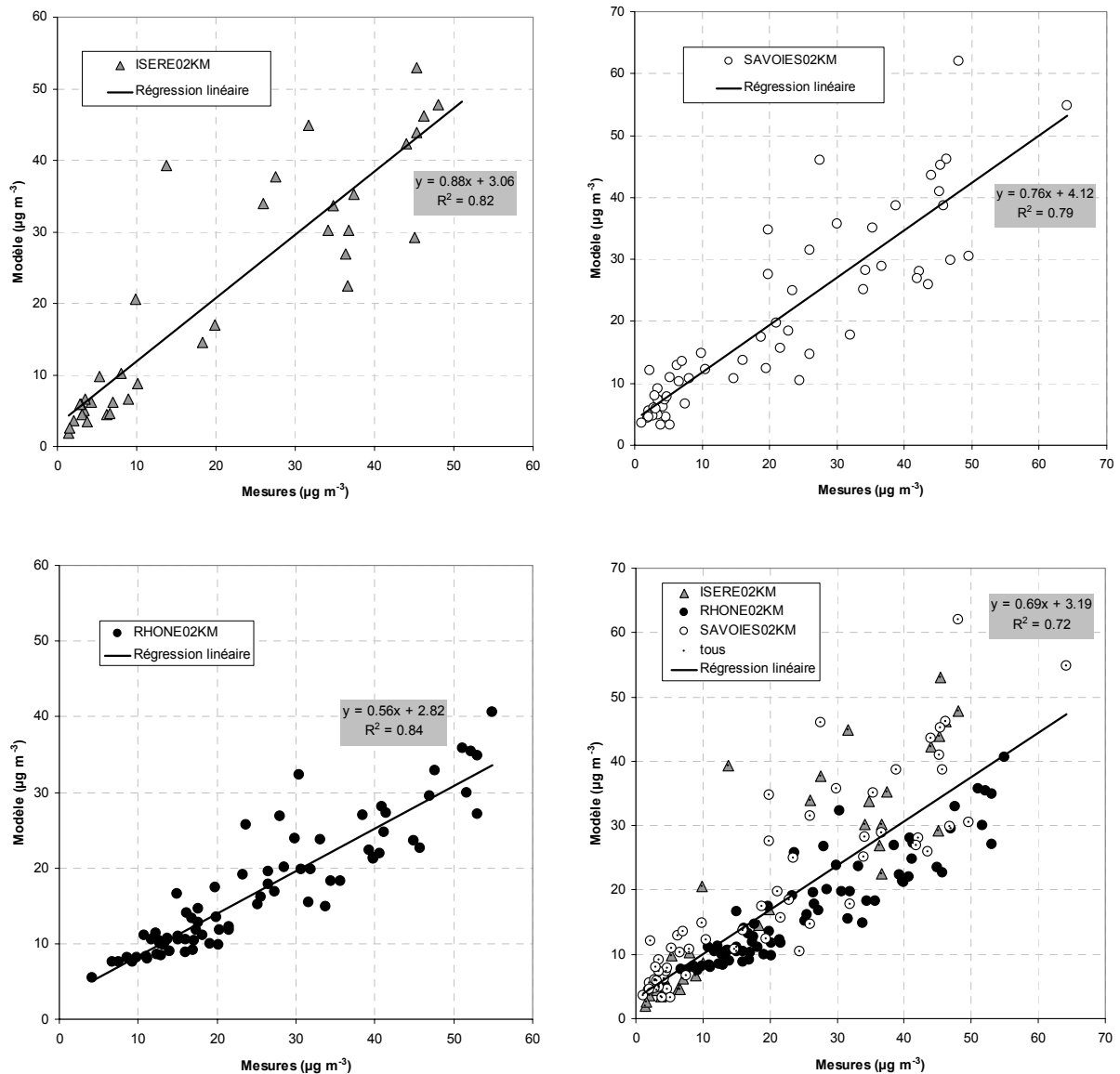


Figure 5-6. Comparaison des moyennes de NO₂ du 1^{er} au 15 février 2005 calculées par le modèle et intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul de la figure 5-1 sont distingués.

En considérant les résultats sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1, le modèle fournit une bonne corrélation pour le NO₂ ($r^2 = 0,72$) avec une droite de régression avec une pente

de 1 et une ordonnée à l'origine de $-1 \mu\text{g m}^{-3}$ (figure 5-6). Pour le benzène, la corrélation est moins bonne ($r^2 \approx 0,4$) et la droite de régression ne passe pas par l'origine, ce qui montre la présence d'un biais (figure 5-7). La pente de la droite de régression est de 0,5, ce qui prouve la présence d'erreurs dans le calcul des concentrations. En effet, le niveau de fond mesuré à l'aide des tubes à diffusion passive est de $1 \mu\text{g m}^{-3}$ alors que le fond du modèle est compris entre 0 et $0,5 \mu\text{g m}^{-3}$. Il est difficile de savoir à quoi est dû exactement ce biais mais étant donné qu'il n'est pas présent sur le NO_2 , on émet quatre hypothèses avec des importances décroissantes : une erreur dans le calcul des émissions, une erreur aux bords de Metphomod issus de CHIMERE, une erreur dans la chimie du benzène et une erreur dans la déposition sèche du benzène. Afin d'améliorer la comparaison avec les mesures, il faudrait poursuivre la recherche dans ce sens. Il n'est pas exclu que des erreurs se compensent dans le calcul du NO_2 mais vu les comparaisons présentées dans la partie 4.2, ce calcul semble correct.

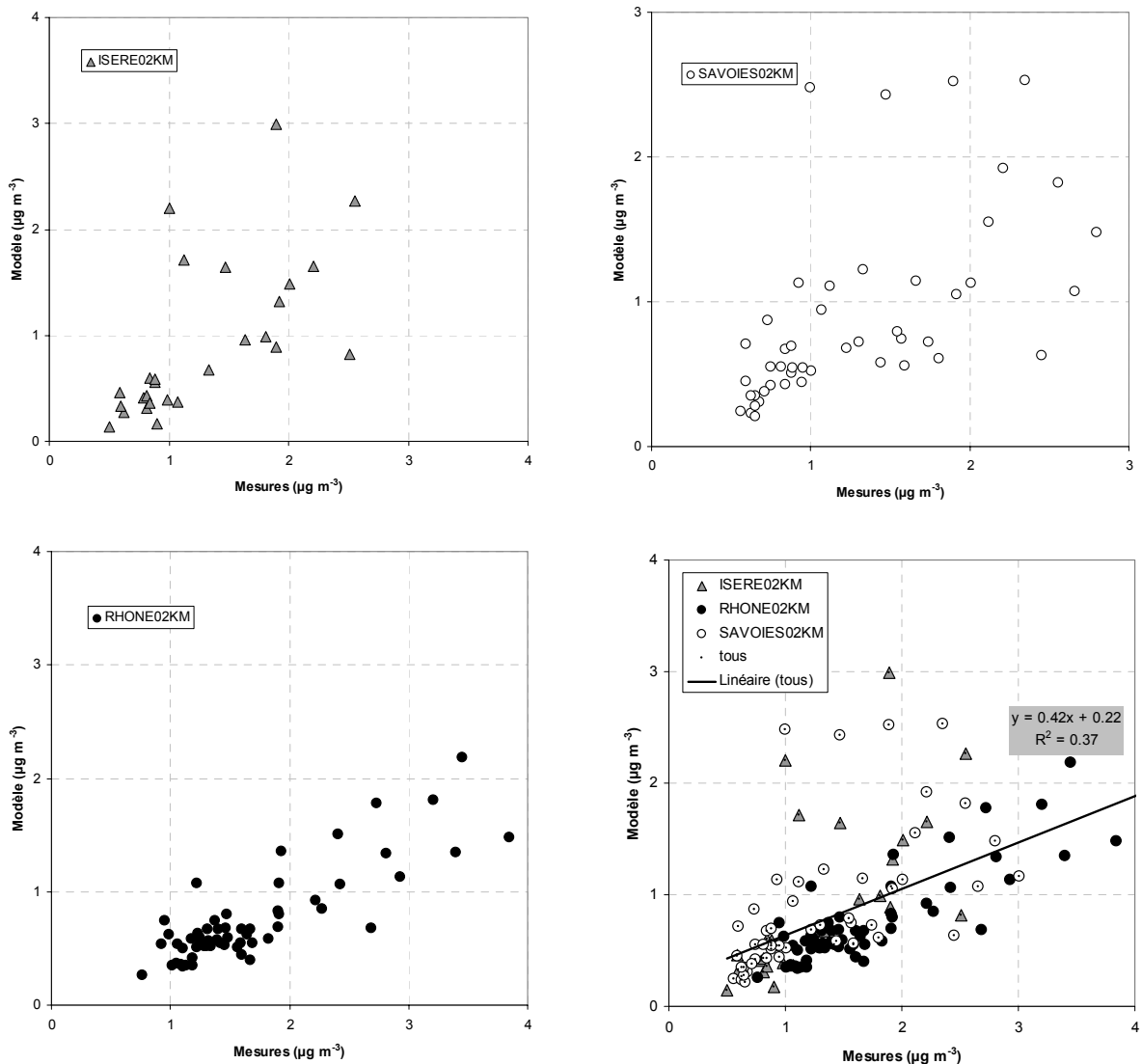


Figure 5-7. Comparaison des moyennes de benzène du 1^{er} au 15 février 2005 calculées par le modèle et intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul de la figure 5-1 sont distingués.

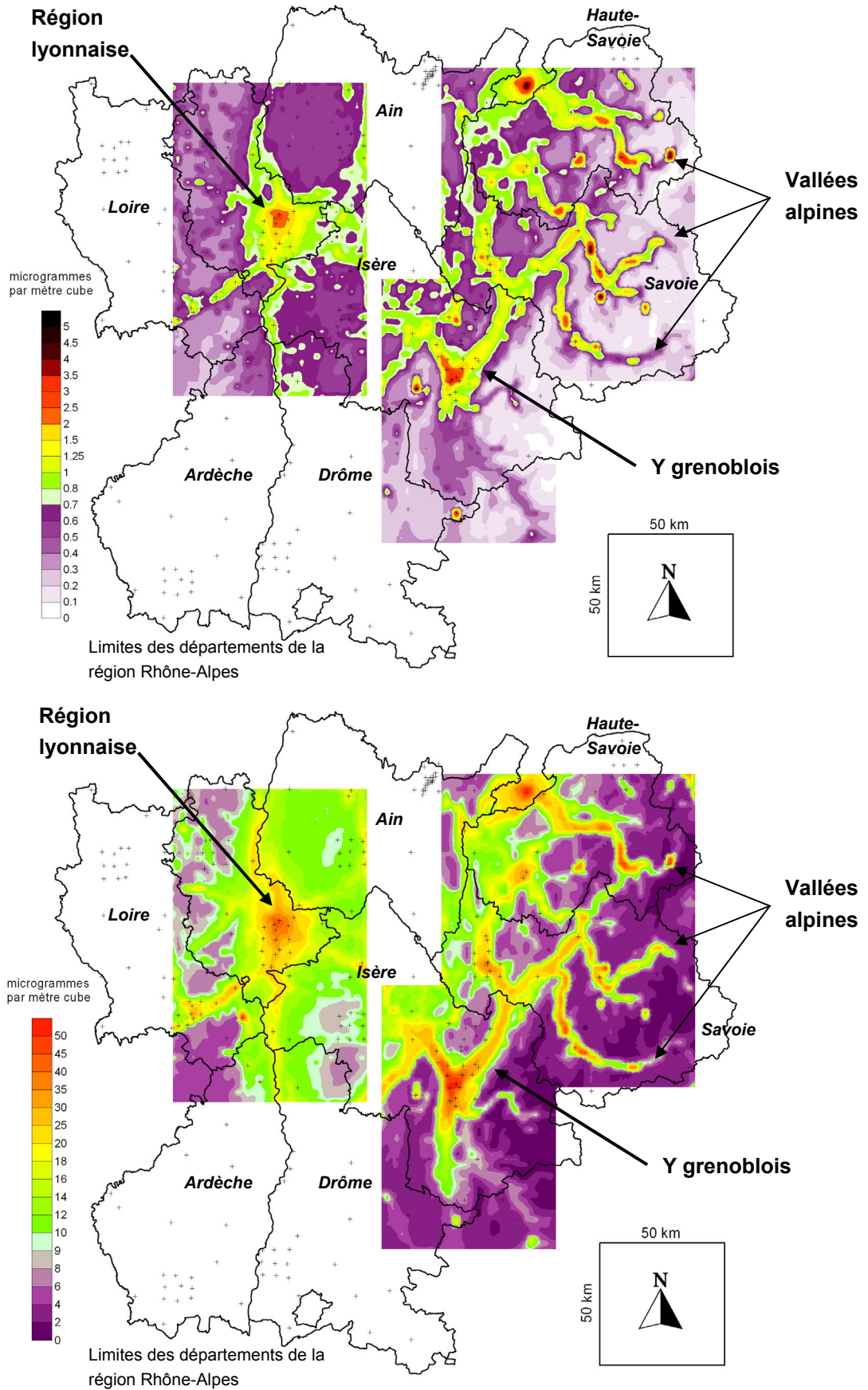


Figure 5-8. Cartographie des concentrations moyennes en $\mu\text{g m}^{-3}$ du 1^{er} au 15 février pour le benzène (haut) et le NO₂ (bas) calculées par Metphomod sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1

La figure 5-8 montre les résultats du calcul sur les trois domaines de la figure 5-1 pour le benzène et le NO₂. En considérant la qualité des résultats discutée plus haut, on peut faire quelques remarques sur la distribution spatiale des deux espèces. Les concentrations en benzène et NO₂ sont les plus élevées dans les agglomérations et dans les vallées parcourues par des axes routiers importants (vallée de l'Arve, Tarentaise, Maurienne). On remarque que les concentrations moyennes en NO₂ dans ces vallées alpines sont comparables à celles de la périphérie des agglomérations grenobloise et lyonnaise. D'après ces résultats et pour la quinzaine étudiée, l'agglomération grenobloise et les agglomérations situées dans les vallées semblent être les sites avec les concentrations moyennes en NO₂ les plus élevées.

5.4. Cartographie de l'ozone du 18 au 26 juin 2002

Comme le benzène et le dioxyde d'azote, l'ozone est un polluant qui peut être mesuré par tube à diffusion. Une étude préliminaire en 2001 a montré la faisabilité de la cartographie de l'ozone sur le département de l'Isère et a mis en place une méthodologie pour sa cartographie [Chaxel, 2001]. En 2002, une campagne impliquant toutes les AASQA de la région Rhône-Alpes a permis d'échantillonner le territoire régional à l'aide de 538 sites équipés de tubes. Cette campagne comportait la mise en place des tubes lors de 6 périodes d'une durée d'une semaine chacune. Chaque période est supposée être représentative du mois correspondant. Le tableau 5-3 fournit la date des différentes campagnes. L'échantillonnage spatial a été basé sur les résultats de l'étude préliminaire effectuée durant l'été 2001 sur le département de l'Isère [Chaxel, 2001].

Tableau 5-3. Dates des campagnes de mesure de l'ozone par tube à diffusion lors de l'été 2002

	mois	périodes d'échantillonnage
campagne 1	avril	23 au 30 avril
campagne 2	mai	23 au 30 mai
campagne 3	juin	18 au 25 juin
campagne 4	juillet	16 au 23 juillet
campagne 5	août	20 au 28 août
campagne 6	septembre	17 au 24 septembre

Pour cette cartographie, le maillage est différent de celui du benzène et quatre tailles de maille ont été préconisées de manière à adapter la précision des résultats à la densité de population de la zone :

- maillage de proximité 5 km sur 5 km : ce maillage est concentré sur les agglomérations de plus de 30 000 habitants qui peuvent présenter d'importantes variations de concentrations d'ozone liées aux variations d'émissions de polluants primaires et qui sont les plus peuplées ;

- maillage complémentaire de 10 km sur 10 km : ce maillage se situe sur les agglomérations moins peuplées (de 10 000 à 30 000 habitants) et en bordure des zones urbaines ;
- maillage grande distance de 30 km sur 30 km : ce maillage se situe sur les zones dont l'altitude est supérieure à 500m, zones les moins peuplées nécessitant des résultats moins précis et où les concentrations sont plus fortement corrélées à l'altitude ;
- maillage principal de 15 km sur 15 km : ce maillage plus dense que le précédent se situe sur l'ensemble des zones non couvertes par les maillages précédents. Il permet de caractériser essentiellement des zones rurales pauvres en émissions de polluants.

Afin de comparer les résultats de la chaîne de modèles aux mesures intégrées sur une semaine des tubes à diffusion passive, nous étudions la période du 18 au 25 juin 2002. Cette période est une période qui a connu les pics d'ozone les plus élevés de l'été. La figure 5-9 montre les concentrations d'ozone mesurées aux stations du Casset et de Grenoble les Frênes durant l'été 2002. Le seuil d'information et de recommandation de la population de $180 \mu\text{g m}^{-3}$ a été dépassé les 21, 22, 23 et 27 juin. La chaîne de modèles PREVALP est utilisée pour simuler la période du 18 au 26 juin selon la même méthodologie que les simulations présentées aux chapitres 3 et 4. Afin de valider le calcul de la dynamique et de la chimie, les résultats de Metphomod sont préalablement comparés aux mesures horaires disponibles aux stations sol pour cette période. Ces données sont disponibles aux stations Météo France de la région Rhône-Alpes et aux stations opérées par les AASQA. Cette validation fait apparaître des phénomènes météorologiques semblables à ceux décrits dans la partie 3.1 pour Grenoble. Le 18 juin 2001 est une journée semblable à la journée du 27 juillet 1999 avec la présence d'un front de vent de vallée sur le plateau du Trièves sous l'effet d'un vent à 750 hPa de sud ouest.

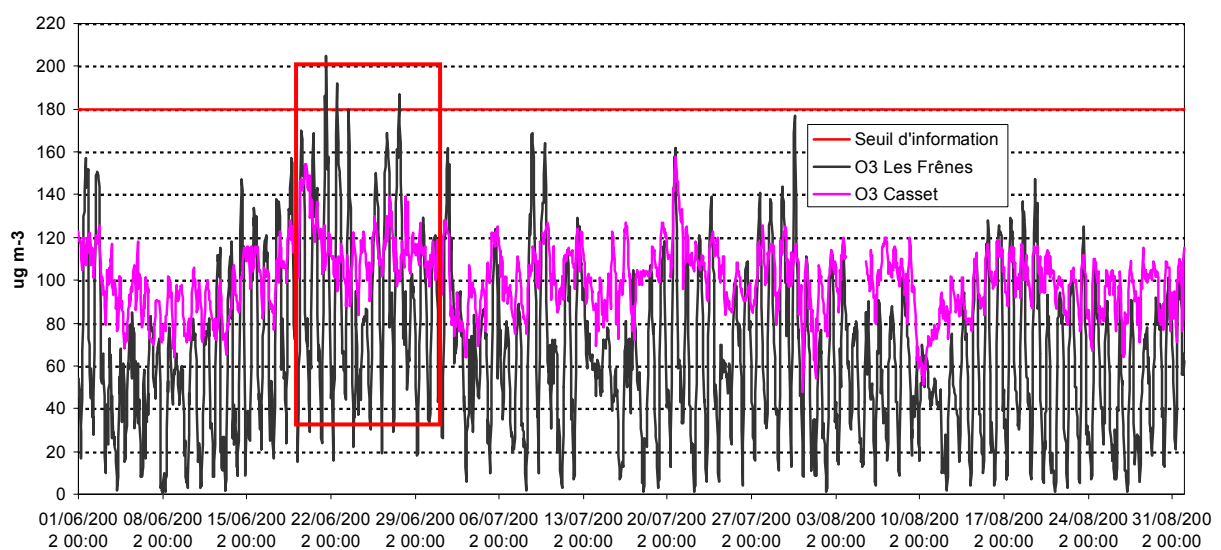


Figure 5-9. Concentrations d'ozone en $\mu\text{g m}^{-3}$ mesurées au Casset et à Grenoble les Frênes durant l'été 2002. La période d'échantillonnage est contenue dans le rectangle rouge.

Le calcul Metphomod est réalisé sur les trois domaines de la figure 5-1. On calcule les concentrations moyennes d’ozone dans la première maille du modèle au-dessus du sol. Ces moyennes sont comparées avec les mesures d’ozone par tube à diffusion passive sur la figure 5-10.

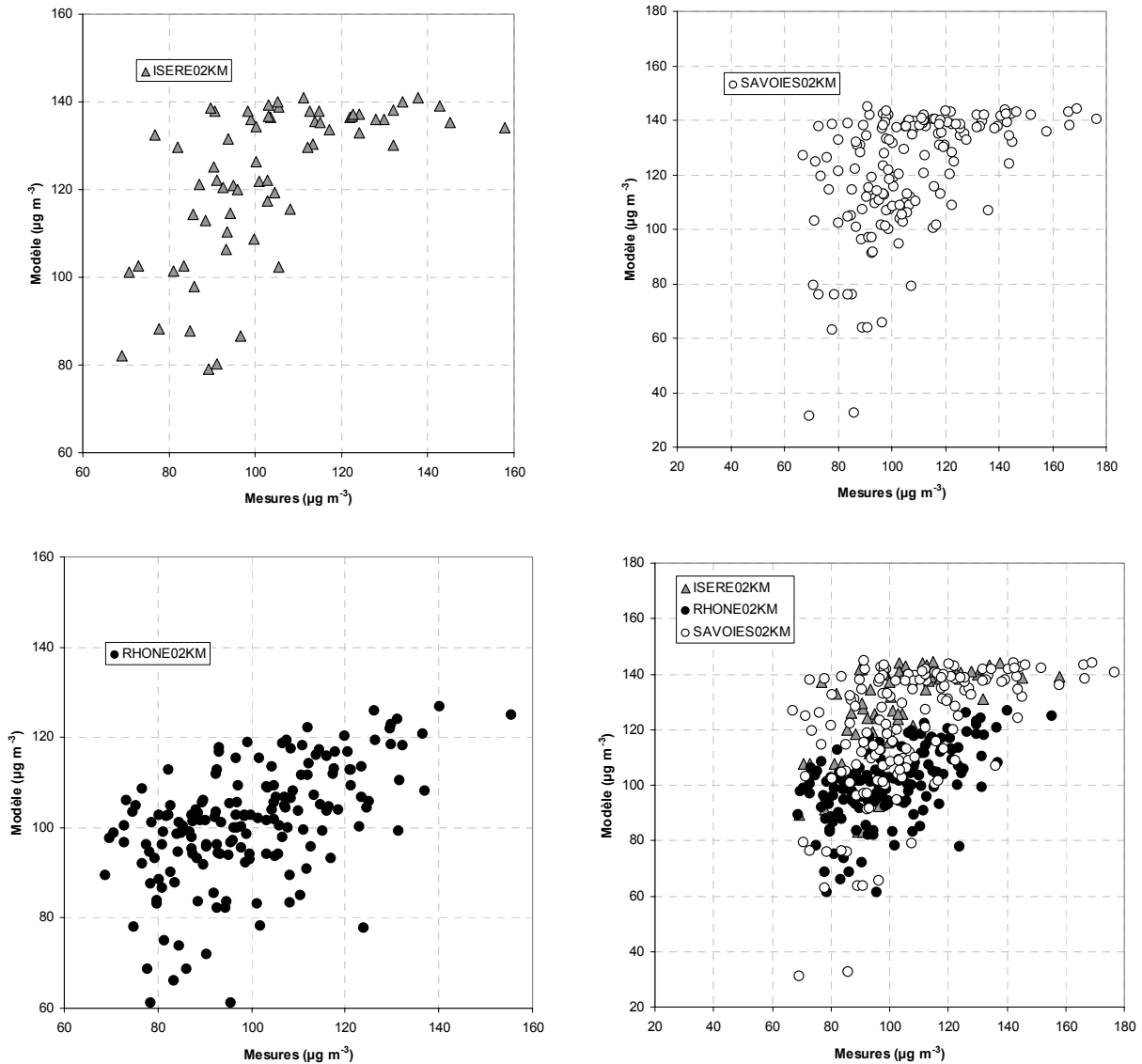


Figure 5-10. Comparaison des moyennes d’ozone sur la semaine 18 au 25 juin 2002 calculées par le modèle avec les valeurs intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul sont indiqués par des symboles différents.

Cette comparaison des moyennes d’ozone donne des résultats très variables selon le domaine de calcul. Les résultats sur les domaines ISERE02KM et SAVOIES02KM présentent une limite des concentrations à $140 \mu\text{g m}^{-3}$ alors que les mesures montent jusqu’à des valeurs approchant $180 \mu\text{g m}^{-3}$. Cette saturation est due aux sites d’altitude. Les concentrations d’ozone dans la troposphère libre semblent mal reproduites par CHIMERE. Etant donné la hauteur du toit de CHIMERE à 500 hPa, la condition au toit du modèle fournie par MOZART

a trop d'influence sur les concentrations d'ozone à de nombreux sites d'altitude. A l'inverse, pour des valeurs de 60 à 120 $\mu\text{g m}^{-3}$, le modèle a eu tendance à surestimer les concentrations. Les moyennes simulées dans le domaine RHONE02KM sont en meilleur accord avec les mesures. Comme pour la simulation du benzène et du NO_2 , la déposition sèche semble jouer un rôle important dans les moyennes hebdomadaires d'ozone. En effet, une mesure à deux mètres du sol est beaucoup plus influencée par la déposition sèche qu'une mesure à plusieurs dizaines de mètres du sol. Cet effet est particulièrement important la nuit dans la couche de surface et de manière moindre durant la journée au sein de la CLC. Une évaluation de l'amplitude de la déposition sèche au-dessus d'un champ dans la vallée de Chamonix est fournie dans la partie 1.2.2 (figure 1-8).

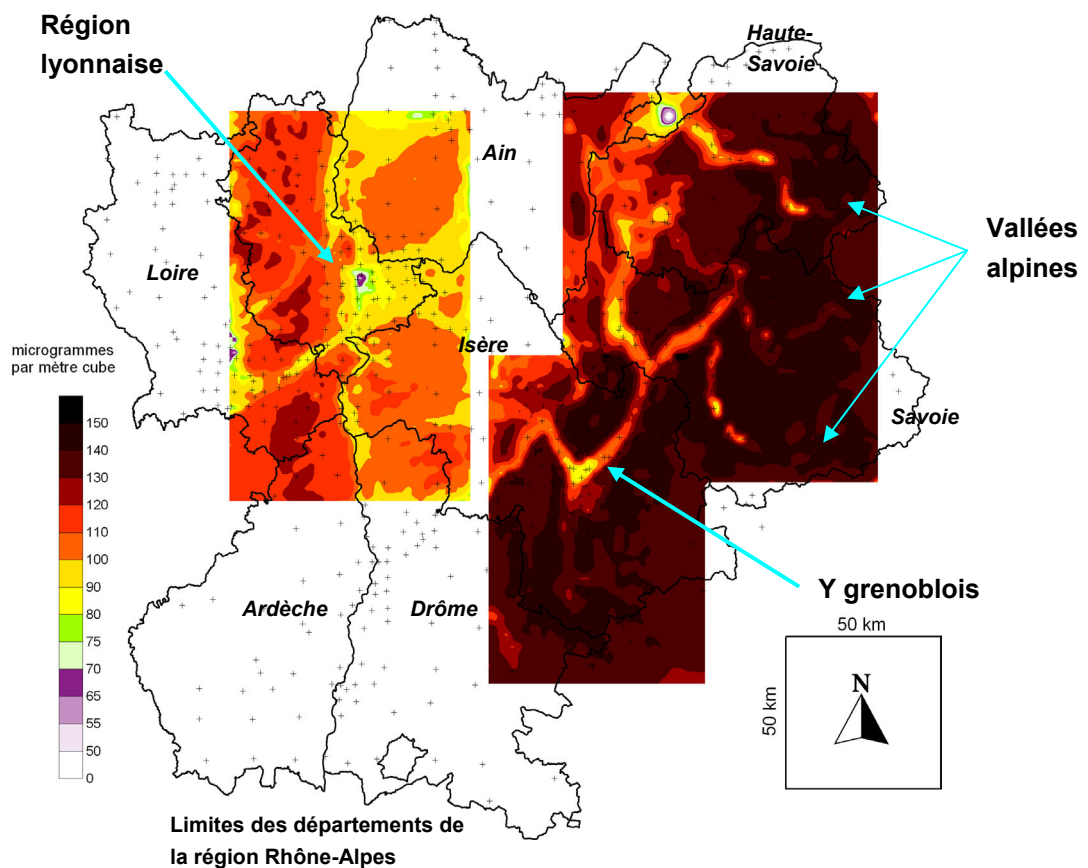
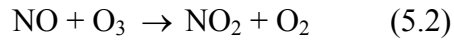


Figure 5-11. Cartographie des concentrations moyennes en $\mu\text{g m}^{-3}$ en ozone du 18 au 25 juin 2002 calculées par Metphomod sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1

La figure 5-11 fournit la cartographie des concentrations moyennes en ozone simulées avec le modèle sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1. Cette carte fait clairement apparaître que les moyennes calculées par le modèle sont beaucoup plus fortes en zone montagneuse que dans les vallées. L'ozone disparaît de l'atmosphère par dépôt sec et par titration par le NO. A proximité des sources de pollution ou dans le panache d'une source, le NO disponible dans l'atmosphère va titrer l'ozone selon la réaction (5.2).



Cette réaction est la réaction majoritaire la nuit dans la couche de surface stable et c'est elle qui contrôle les concentrations nocturnes d'ozone en présence de NO. Cette réaction est également majoritaire durant la journée à proximité des sources de pollution, principalement dans les centres villes. Elle conduit à des concentrations en ozone plus faibles à proximité des sources de NO. A distance des sources, tout le NO est transformé en NO₂ et la réaction n'a plus lieu. En l'absence de sources de NO, le principal puits d'ozone est la déposition sèche. A distance des sources, la déposition sèche contrôle les niveaux d'ozone mesurés au sol et plus on s'éloigne du sol, moins les niveaux sont influencés par la déposition. De cette manière, une mesure d'ozone à proximité de surfaces sur lesquelles se dépose l'ozone n'est pas représentative de la concentration ambiante. Les tubes à diffusion passive sont placés à des hauteurs de 2 à 3 m au-dessus du sol et sont certainement assez influencés par les effets de la déposition sèche. Le modèle calcule une concentration d'ozone dans la première maille au-dessus du sol qui est bien moins influencée par la déposition car la discrétisation verticale induit un lissage des gradients de concentrations verticales. De plus, à cause de son maillage cartésien, la hauteur de la première maille au-dessus du sol de Metphomod varie avec l'altitude. Les effets de la déposition sèche et de la titration de l'ozone par NO dans le modèle dépendent donc de l'altitude. Cela explique pourquoi les sites en altitude sont moins bien décrits que les sites en vallée. Le calcul de la moyenne est très influencé par les minimums. Or ces minimums sont atteints la nuit sous l'effet de la titration de l'ozone par NO et la déposition sèche. Il est donc très difficile de simuler une moyenne d'ozone. Pour les polluants primaires comme le benzène et le NO₂, le principal puits dans la couche de surface est la déposition sèche. Cela permet d'estimer des concentrations moyennes au sol plus facilement.

En conclusion, on a montré que si la chaîne de modèles fournissait une bonne estimation des concentrations moyennes en ozone au sol, les incertitudes liées à ce calcul étaient plus importantes que pour le calcul des concentrations moyennes en polluants primaires comme le NO₂ et le benzène. Des résultats similaires sont obtenus par une étude sur le Portugal à l'aide du modèle CHIMERE et de campagnes de tubes passifs pour le NO₂ et l'ozone [Monteiro, Vautard, Borrego, and Miranda, 2005]. Pour notre calcul, une incertitude de 20 µg m⁻³ sur la concentration moyenne semble suffisante pour interpréter la carte de la figure 5-11. Cette valeur correspond à la taille du nuage de points pour le calcul sur les trois domaines de la figure 5-10. Afin d'utiliser les concentrations en ozone calculées par le modèle, un post-traitement est nécessaire. Il serait intéressant de recalculer une concentration en ozone au sol à partir de la concentration dans la première maille, des paramètres de stabilité dans la couche de surface et des concentrations en NO₂ d'une manière analogue au calcul de la température à deux mètres et du vent à 10 mètres de MM5. L'augmentation de la résolution verticale du modèle apporterait également une amélioration des résultats. Pour ce type d'étude, faisant

intervenir de forts gradients de concentration dans la couche de surface, des modèles avec des coordonnées qui suivent le terrain sont plus adaptés.

Cette étude a confirmé, à la fois expérimentalement et numériquement, que les concentrations moyennes en ozone sont plus élevées en montagne qu'en plaine. Dans les zones montagneuses, la végétation est basse ou inexistante. Ceci conduit à des vitesses de déposition très faibles et au maintien de niveaux d'ozone élevés tout au long de la journée et de la nuit. En plaine, sous l'effet des émissions de NO et de vitesses de dépôt plus élevées à cause de la présence de canopées plus denses, le cycle diurne de l'ozone est beaucoup plus marqué.



**Chapitre 6. Calculs d'incertitudes et études de sensibilité
liés aux émissions de COV biogéniques et au climat**

Le calcul d'incertitudes pour un modèle déterministe est rendu très délicat par la complexité du modèle et le nombre important d'hypothèses réalisées pour les différents calculs. Dans le cas d'un modèle traitant de la chimie de l'atmosphère, les incertitudes sont nombreuses. Les différents calculs créent les uns après les autres des incertitudes : le calcul des émissions de polluants au sol, le calcul météorologique, le calcul de la dispersion et le calcul chimique. L'utilisation de plusieurs domaines de calcul emboîtés est également une source d'incertitude. On devine alors, qu'à moins de disposer d'un nombre important de machines (et de stagiaires), toutes les incertitudes du modèle ne peuvent pas être évaluées. Dans ce chapitre, on propose de s'intéresser aux effets de quelques modifications de la chaîne de calcul sur la hauteur de mélange calculée par les modèles et sur la production d'ozone. Ainsi on a testé quelques configurations que l'on a jugées responsables des incertitudes les plus fortes.

- L'impact d'un réchauffement de 1 % de l'atmosphère, ce qui équivaut à une augmentation d'environ 3 K au niveau de la mer ;
- L'impact de la teneur en eau du sol et de la végétation sur le développement convectif de la CLC ;
- L'impact de la distribution spatiale et de l'intensité des émissions biogéniques du modèle.

Ces tests ont été réalisés sur une période déjà analysée dans ce manuscrit, soit la période de canicule d'août 2003. Il était intéressant de conduire des tests de sensibilité sur cette période pour connaître les impacts de différents paramètres en cas d'évènement extrême.

6.1. Principe des simulations de sensibilité

La chaîne de modèles est utilisée dans sa configuration de base décrite au chapitre 2 sur le domaine centré sur Grenoble de la figure 3-2 sur la période du 1^{er} au 8 août 2003. La simulation du cas de base pour cette période a été présentée dans la partie 4.1. Les différents scénarios testés sont récapitulés dans le tableau 6-1.

Afin de tester l'impact d'une augmentation de la température sur le mélange vertical et sur la production d'ozone, la température absolue obtenue du calcul MM5 est augmentée de 1 %. Grâce à cette température modifiée, on calcule les autres variables d'entrée de Metphomod dont la température potentielle virtuelle. Si l'impact sur la hauteur de mélange calculée par le modèle est facile à évaluer, l'impact sur la production d'ozone est difficile à déterminer puisque modifier la température influe à la fois sur le mélange vertical et sur les constantes de réaction contrôlant la cinétique chimique.

Il a été montré dans ce manuscrit que les paramètres de sol du modèle déterminent la mise en place des régimes locaux de vent et la vitesse de développement de la CLC. Un paramètre jouant un grand rôle dans le développement de la CLC dans les vallées est la teneur en eau

dans le sol et dans la canopée [De Wekker, Steyn, Fast, Rotach, and Zhong, 2005]. Les simulations estivales de Metphomod ont été réalisées avec une teneur en eau des pores du sol de 10 % et des teneurs en eau de la végétation de 20 %. Pour tester l’impact de la teneur en eau, des simulations sont réalisées avec une teneur en eau des pores du sol de 100 % et des teneurs en eau de la végétation de 50 %.

Tableau 6-1. Scénarios de sensibilité et principales modification par rapport au cas de base (BC)

Simulation	Nom	Description
BC	Cas de base	Cas décrit dans la partie 4.1
T1	Scénario climatique	Le forçage météorologique MM5 pour la température est augmenté de 1 %, ce qui équivaut à 3 K à Grenoble
BIO2	Scénario avec des émissions biogéniques élevées	Les sols et les végétaux émettent deux fois plus de NO et de COVB
BIO0	Scénario en l’absence d’émissions biogéniques	Les sols et les végétaux n’émettent pas de NO ni de COVB
PAR	Scénario avec calcul des émissions de COVB modifiées	Le calcul du flux de PAR (voir partie 2.6) est modifié pour le rendre plus réaliste
HUMIDE	Scénario avec sol et végétaux humides	L’humidité des pores du sol est fixée à 100 % et celle des végétaux à 50 %

Les émissions biogéniques de COV jouent un grand rôle dans la production d’ozone dans les vallées car elles sont réalisées sur les versants où une forte activité convective se développe et elles sont rapidement mélangées avec les NO_x émis en fond de vallée et transportés en altitude par les vents de pente ou les thermiques. Nous testons dans la suite un doublement des émissions biogéniques sur la période de canicule d’août 2003. Comme signalé dans la partie 2.6, les modèles de calcul de ces émissions possèdent des incertitudes très importantes pouvant atteindre 500 à 1000 % pour certaines régions d’Europe et pour des épisodes photochimiques particuliers [Simpson, Guenther, Hewitt, and Steinbrecher, 1995]. Ce calcul va permettre de déterminer quelle est l’erreur commise sur les maximums d’ozone en cas de surestimation ou de sous-estimation des émissions biogéniques. Le doublement des émissions concerne les espèces ISO (isoprène) et API (α -pinène) du mécanisme RACM. Deux inventaires d’occupation des sols ont été utilisés dans notre chaîne de modélisation : la base de données de l’Université du Maryland, USA [Hansen, De Fries, Townshend, and Sohlberg, 1998] et la classification CORINE Land Cover pour l’année de référence 2000. Ces deux inventaires ont été utilisés tour à tour pour le calcul des émissions de COVB.

Toutes les simulations sont réalisées avec des conditions de bords identiques issues du calcul CHIMERE sur la région Rhône-Alpes décrit dans la partie 2.2.2.

6.2. Impact d'un réchauffement global

Dans notre calcul, une augmentation de la température de 1 % sur toute la colonne atmosphérique va modifier la stratification de l'atmosphère et des grandeurs physiques comme l'humidité. La modification de la stratification de l'atmosphère va modifier sa stabilité. Le développement de la CLC pourra être alors plus ou moins important (figure 6-1). Selon l'augmentation ou la diminution de la hauteur de la CLC, les polluants seront plus ou moins dilués. Le second effet d'une augmentation de température est la modification des constantes de réactions. Selon la réaction du mécanisme RACM considérée, sa cinétique va être accélérée ou ralentie. Il est difficile de porter des conclusions sur les effets relatifs de ces deux processus sur les concentrations d'ozone. La figure 6-1 montre que la hauteur maximale de la CLC est très semblable pour le cas de base et pour le scénario d'augmentation de la température T1 pour tous les jours de la période simulés. Par contre les horaires de début de développement et de disparition sont différents pour certaines journées.

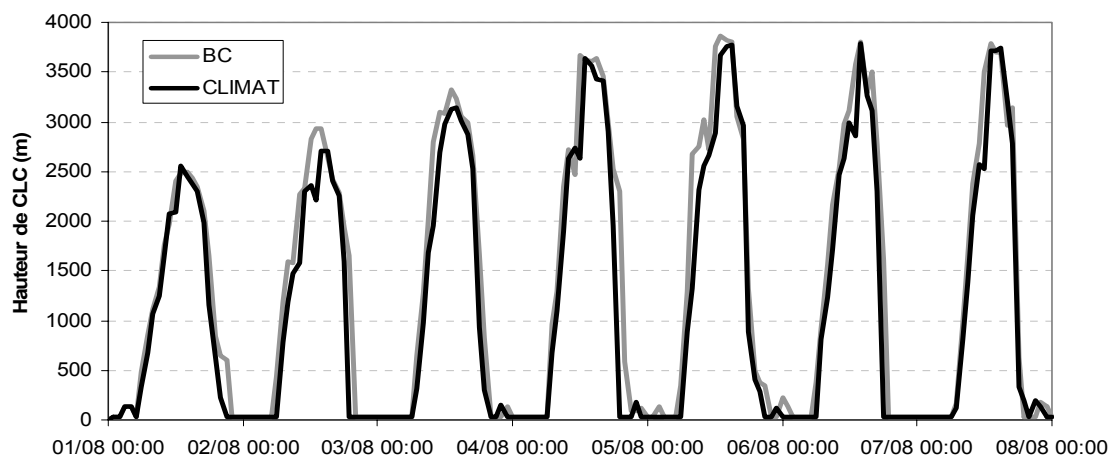


Figure 6-1. Hauteur en mètres de la CLC au-dessus du site de Grenoble les Frênes pour le cas de base (BC) et pour une augmentation de 1 % de la température (CLIMAT)

L'humidité est plus faible dans le cas du scénario T1. Une diminution de 5 % de la valeur de l'humidité relative dans le premier niveau du modèle au-dessus du sol est observée dans la simulation dans la cuvette. Cette diminution est due à l'augmentation de la pression de vapeur saturante avec la température qui conduit, à rapport de mélange en vapeur constant, à une augmentation de l'humidité relative. A part la température et l'humidité, les autres paramètres dynamiques sont très peu sensibles à l'augmentation de température. Certains jours, le vent de vallée se développe une heure plus tôt dans le scénario T1 mais en règle générale les champs de vent calculés par le modèle sont très semblables. Les variations les plus sensibles du vent de vallée sont observées dans la cuvette grenobloise. Les maximums d'ozone simulés pour la période du 1^{er} au 7 août dans le scénario T1 présentent les mêmes emplacements géographiques que ceux du cas de base (figure 6-2).

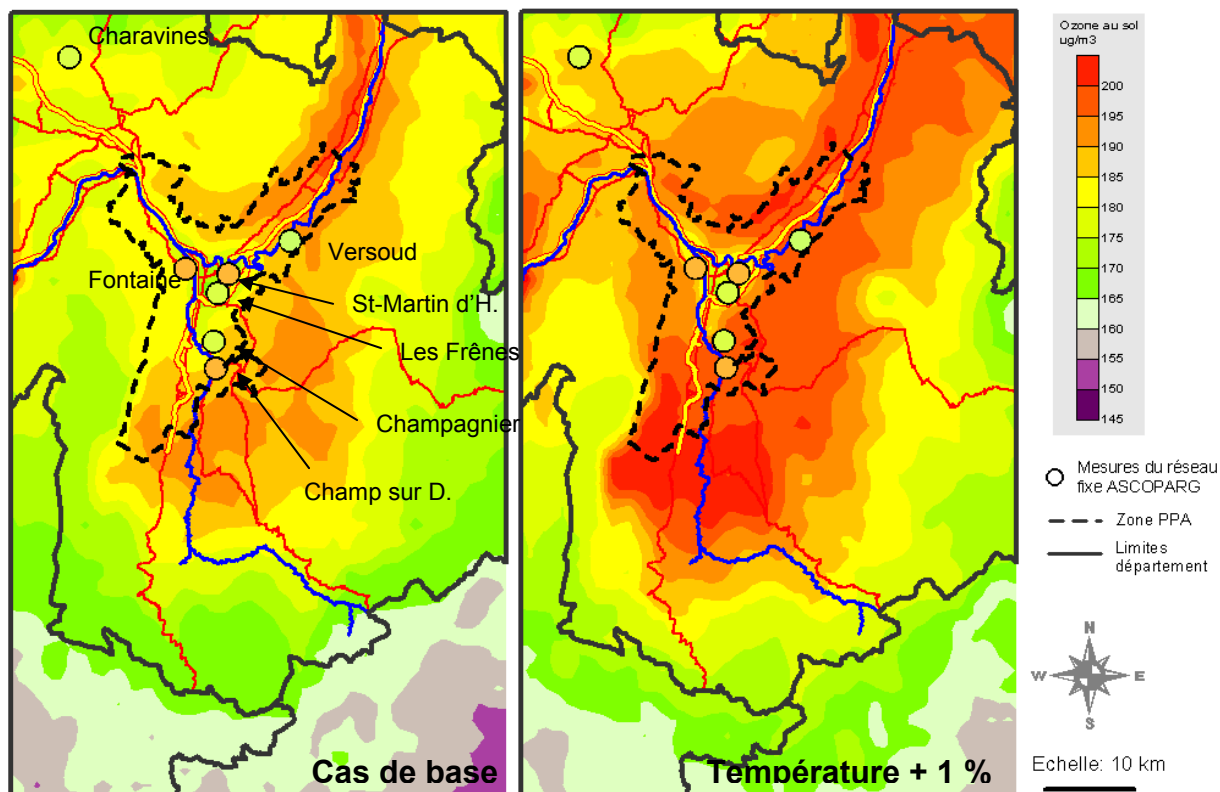


Figure 6-2. Moyenne en $\mu\text{g m}^{-3}$ des pics d'ozone simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine de la figure 3-2 (échelle de couleur) et mesurés (points) pour le cas de base à gauche et le scénario T1 à droite

L'augmentation des maximums d'ozone a sol est de l'ordre de 10 à 15 $\mu\text{g m}^{-3}$. La figure 6-3 montre l'aspect du panache de l'agglomération dans un plan vertical pour la journée du 4 août 2003. La journée du 4 août a été introduite dans la partie 4.1. Il s'agit d'une journée où le régime de CLC est piégé. On remarque sur la figure la présence du front de brise de vallée à la coordonnée $Y = 30$ km où les gradients horizontaux de concentration en ozone sont très forts. Les isocontours de température potentielle virtuelle sont très similaires entre les deux simulations avec un offset de 3 K près. Cela montre que le mélange vertical entre les deux simulations est très semblable.

Conclusion et perspectives

Cette simulation montre l'impact d'une augmentation de 1 % des températures dans le cas d'un événement extrême comme celui de la canicule de 2003. A émissions égales, les concentrations en ozone dans la périphérie de l'agglomération grenobloise augmenteront. L'augmentation pourra atteindre 10 % dans le panache au sud de l'agglomération. Dans la proche banlieue de Grenoble, les augmentations sont de l'ordre de 7 %. En ville, l'augmentation des concentrations en ozone ne dépasse pas 3 %. Ces augmentations sont essentiellement liées à la cinétique chimique des réactions chimiques. La formation de radicaux est plus rapide par fortes températures et la production d'ozone accélérée. Il est

normal que l'impact de la température soit le plus important dans le panache d'ozone où ces réactions ont lieu. En milieu urbain, la réaction de titration de l'ozone par NO domine la chimie de l'ozone et cette réaction est peu sensible à la température.

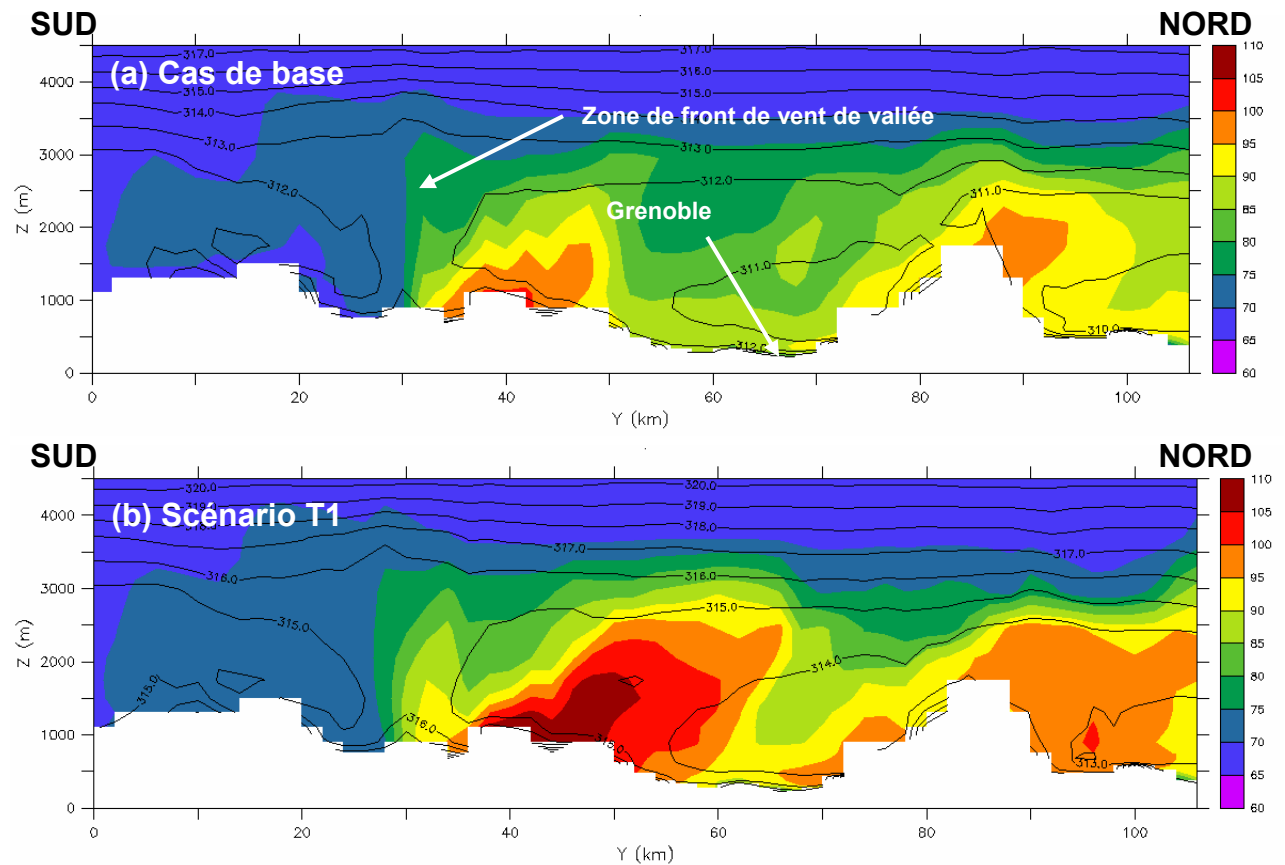


Figure 6-3. Ozone en ppbV (couleurs) et température potentielle virtuelle en K (isocontours) simulés dans un plan vertical nord-sud passant par Grenoble (en UTM 31, x = 615 km) le 4 août 2003 à 16 h HL pour le cas de base en haut et pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3,7 K à 0 m asl) en bas

L'augmentation simulée en ville est certainement liée à l'augmentation de la production en périphérie de l'agglomération. L'ozone produit à la périphérie de Grenoble est mélangé à l'atmosphère de la vallée. C'est ce que semble montrer la figure 6-3. Cette augmentation de un pourcent de la température de l'atmosphère équivaut à augmenter la température à Grenoble de 3 K. Cette augmentation de température correspond à l'augmentation moyenne de la température à la surface de la Terre d'ici la fin du XXIème siècle dans certaines projections réalisées par l'IPCC. Même si ce cas d'étude est très académique, il montre qu'à l'échelle locale, une augmentation de un pourcent de la température aboutit à une augmentation de 10 % des concentrations en ozone. Cette augmentation de 10 % correspond à une augmentation de 25 % de la production locale d'ozone avec les résultats obtenus dans la partie 4.1. Cet effet est causé par la non linéarité de la production d'ozone. Cette étude montre néanmoins, qu'en cas de changement climatique à l'échelle locale, les conséquences dans la région pourraient être importantes. On entend par changement climatique à l'échelle locale,

l'augmentation des températures maximales journalières l'été et l'augmentation de la fréquence des épisodes extrêmes comme celui d'août 2003. A la lumière de ces résultats, une augmentation de la température aurait un impact sur les dépassements des valeurs limites en moyenne horaire qui sont de $180 \mu\text{g m}^{-3}$ et de $240 \mu\text{g m}^{-3}$.

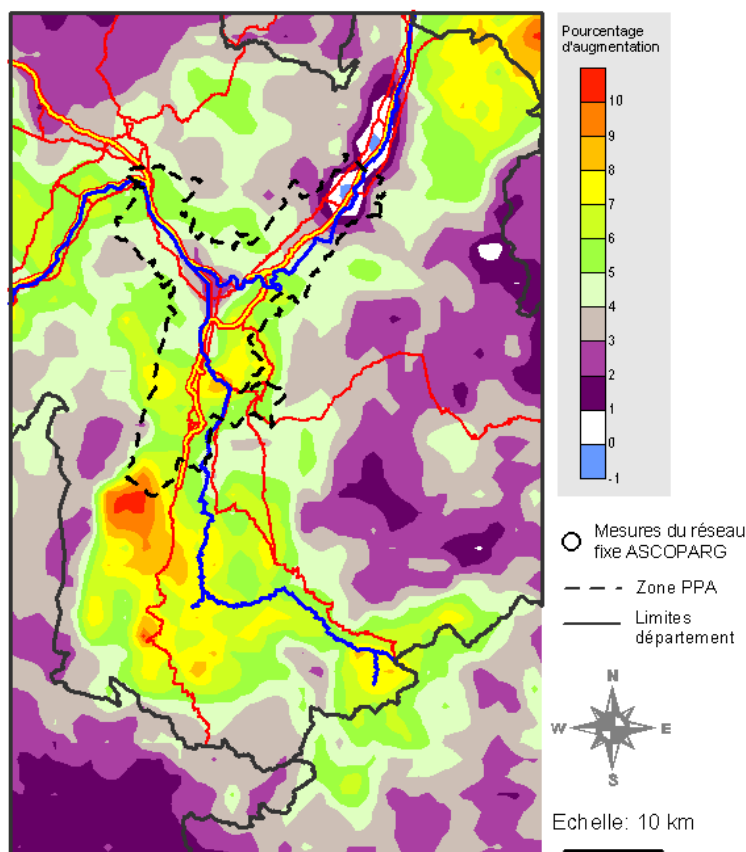


Figure 6-4. Pourcentage d'augmentation de la moyenne des pics d'ozone moyens simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3 K au niveau de la mer)

Cette étude était réalisée avec des conditions de bords pour la chimie identiques au cas de base et ne prend pas en compte les changements de la composition de l'atmosphère à l'extérieur du domaine. On a vu dans la partie 4.1 que l'ozone entrant aux bords du domaine de Grenoble représentait entre 60 et 70 % de l'ozone dans le panache de l'agglomération. Un changement des niveaux de fond à l'échelle planétaire aura donc une répercussion importante sur les pics d'ozone mesurés dans l'avenir.

6.3. Distribution et intensité des émissions biogéniques

La partie 2.6 a présenté le calcul des émissions biogéniques pour les simulations CHIMERE et Metphomod. Nous utilisons le même modèle aux échelles régionales et locales, or ce modèle est un modèle développé pour évaluer les émissions européennes [Simpson, Guenther, Hewitt, and Steinbrecher, 1995]. Les incertitudes calculées lors de son utilisation pour évaluer

les émissions de COVB en Europe étaient d'un facteur 2-3 en moyenne [Simpson and al., 1999]. Ce modèle appliqué à l'échelle régionale a été validé lors de l'expérience ESQUIF à l'aide de mesures sol et aéroportées [Derognat, Beekmann, Baueumle, Martin, and Schmidt, 2003]. L'incertitude qui a été évaluée grâce aux mesures et au modèle CHIMERE correspondait à un facteur 1,5. Afin de valider les émissions de COVB dans la région grenobloise, nous disposons de très peu d'informations. La seule mesure donnant accès à une concentration d'isoprène est réalisée à Champagnier. Les émissions de COVB dans le domaine de Metphomod de la figure 3-2 ont été évaluées à 59 % des émissions totales de COVNM en moyenne annuelle [Quiniou and Chanut, 2005]. La figure 6-5 montre la répartition des émissions des COVNM estimées dans la région grenobloise pour l'année 2003. Vu la part importante des émissions biogéniques dans les émissions de COVNM, les émissions biogéniques vont jouer un rôle très important dans la photochimie comme l'ont montré les programmes ESQUIF [Derognat, Beekmann, Baueumle, Martin, and Schmidt, 2003] ou ESCOMPTE [Lasry, Coll, and Buisson, 2005]. Cet effet est d'autant plus important que les espèces émises, essentiellement l'isoprène et les terpènes, sont très réactives avec les radicaux HO• et participent très rapidement à la production d'ozone.

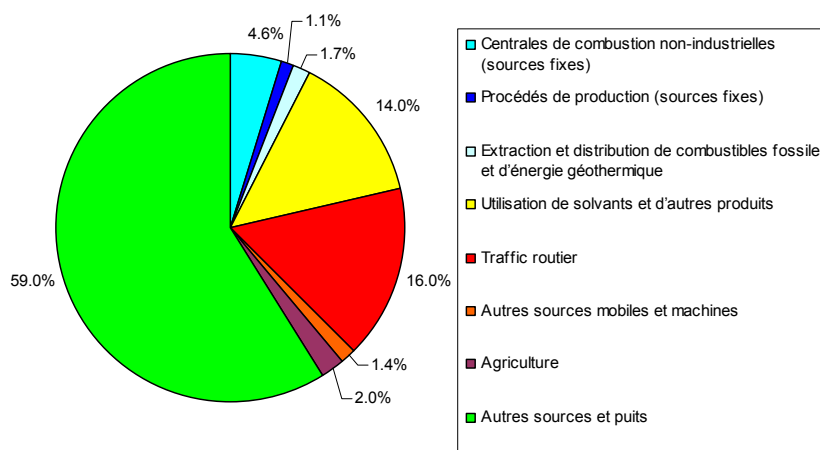


Figure 6-5. Répartition des émissions surfaciques de COVNM totaux dans le domaine de calcul de Metphomod pour la région grenobloise (36 * 54 mailles de 4 km² chacune) pour l'année 2003 [Quiniou and Chanut, 2005]

Afin de vérifier l'impact des COVB sur la photochimie dans la région grenobloise, nous avons réalisé trois simulations en prenant comme période de référence la première semaine de la canicule de 2003 : la première simulation est le cas de base présenté dans la partie 4.1, la seconde est une simulation non réaliste sans émissions biogéniques alors que la troisième est une simulation réalisée en doublant les émissions biogéniques. Par là, nous avons voulu tester quel était l'impact sur la photochimie d'une incertitude d'un facteur 2 sur les émissions de COVB. A ces trois simulations s'ajoute une comparaison des deux inventaires d'occupation des sols disponibles : la base de données de l'Université du Maryland, USA [Hansen, De Fries, Townshend, and Sohlberg, 1998] et la classification CORINE Land Cover pour l'année

de référence 2000. On a montré dans la partie 2.6 que la composition des émissions biogéniques était liée aux parts respectives de feuillus et de résineux dans les forêts. La figure 2-17 montrait qu'avec l'inventaire CORINE Land Cover, le rapport des émissions ISO/API diminuait avec l'altitude des terrains à cause de l'augmentation de la part de résineux dans les forêts avec l'altitude. Cela n'est pas le cas avec l'inventaire de l'Université du Maryland qui donne une autre répartition des feuillus et des résineux. Un calcul a été réalisé pour chacun des deux inventaires sur la période du 1^{er} au 8 août 2003 et a montré d'importantes différences pour les concentrations d'ozone maximales au sol. Etant donnée la bonne représentation du couvert végétal dans les vallées fournie par CORINE Land Cover, ce dernier inventaire a été utilisé pour nos simulations avec Metphomod à l'échelle de la région grenobloise.

Cycle diurne de quelques COV à un site périurbain et modélisation des émissions de COVB

Les différents COV dans l'atmosphère ont des cycles diurnes différents les uns des autres dépendant essentiellement de leur réactivité avec les oxydants de l'atmosphère, des émissions dans l'atmosphère et des conditions de dispersion. Pour les 14 jours de canicule de 2003, les conditions de dispersion étaient sensiblement les mêmes (régime de vent de vallée), ce qui permet de calculer un profil diurne moyen pour différents COV à l'aide des mesures horaires disponibles au site de Champagnier. Pour ce calcul, les différences entre les émissions d'un jour de semaine, d'un samedi et d'un dimanche sont négligées. Le site de Champagnier est un site péri-urbain en bordure d'un village et à proximité d'un site industriel. De nombreux COV mesurés à ce site ont donc une source industrielle comme le montre [Troussier and Locoge, 2004]. La figure 6-6 présente le cycle diurne moyen de quelques COV mesurés à la station de Champagnier au sud de Grenoble (localisation sur la figure 3-2).

Le cycle le plus étonnant est celui de l'isoprène (2-méthyl-1,3-butadiène). Ce composé présente un maximum de concentration dans l'après-midi entre 17 h et 20 h HL alors que tous les autres COV atteignent leur minimum. Le minimum des autres COV est obtenu grâce à des conditions de mélange optimales dues au vent de vallée, atteignant son maximum de force à 19 h HL, et à un mélange convectif important. L'isoprène est émis à la fois par le trafic (1 % de l'échappement) et par les végétaux à feuilles caduques (hêtre, chêne,...). Etant donné les profil d'émissions des COVB présentés sur la figure 2-16, l'isoprène observé à Champagnier dans l'après-midi est certainement émis en grande partie par des sources biogéniques. La fraction anthropique est détectée la nuit en l'absence d'émissions biogéniques et le matin lorsque les autres COV présentent eux aussi des pics de concentrations dus à l'augmentation de l'activité humaine dans la cuvette. Ces observations sont également faites par [Troussier and Locoge, 2004] pour le site de Champagnier. Les concentrations en isoprène élevées dans l'après-midi indiquent que les émissions d'isoprène sont très importantes dans la zone de Champagnier et dans toute la cuvette grenobloise. L'absence d'un pic matinal marqué lié aux

émissions biogéniques tend à prouver que ces émissions sont réalisées à distance du site et que l'isoprène est transporté sur le site de Champagnier par le vent de vallée. L'autre hypothèse est que les émissions d'isoprène sont très faibles avant 7 h TU (9 h HL), heure à laquelle la couche de surface stable est détruite. L'isoprène est l'un des COV les plus réactifs et un calcul précis des émissions biogéniques prenant en compte l'ensoleillement et la température est déterminant pour le calcul photochimique (partie 2.6).

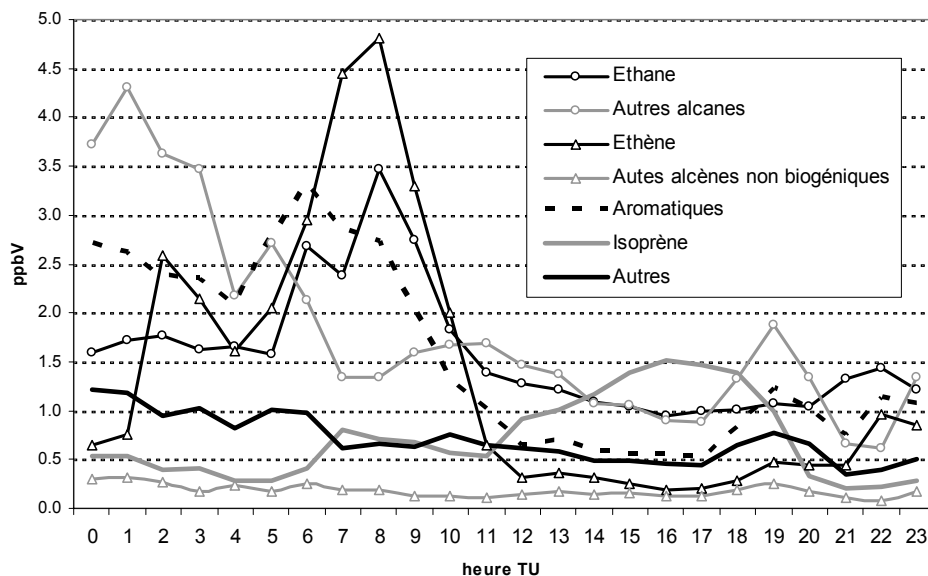


Figure 6-6. Cycle diurne moyen de différents COV pour les 14 jours de canicule de 2003 calculé à l'aide des mesures au site de Champagnier sur la photo (en été, HL = TU + 2 h)

Les émissions de COV biogéniques sont calculées à l'aide du modèle de Guenther et al. [1995] et Simpson et al. [1999]. Une validation empirique de ce modèle est réalisée à l'aide des mesures d'isoprène à Champagnier réalisées par le chromatographe Perkin Elmer. Les concentrations à 17 h HL en isoprène sont comparées sur la figure 6-7 à la température à la même heure au même site. Le modèle est une fonction $f(T) = k * E(T)$, où $E(T)$ est l'émission surfacique d'isoprène calculée par le modèle de Guenther en fonction de la température à 2 mètres T et k une constante multiplicative indépendante de la température qui prend en compte les conditions de mélange, d'advection et d'ensoleillement. Le modèle s'ajuste très bien aux mesures ce qui signifie que le coefficient de proportionnalité k entre la concentration d'isoprène dans l'air et l'émission à 17 HL est constant dans le temps. Deux périodes posent néanmoins des problèmes. En juin, par fortes températures ($> 30^{\circ}\text{C}$), les concentrations en isoprène ont tendance à être plus élevées. Durant la canicule, les concentrations semblent s'ajuster plus ou moins au modèle selon la première ou la deuxième semaine. Alors que durant la première semaine, les concentrations suivent assez bien le modèle de Guenther, la deuxième semaine, les concentrations sont inférieures aux concentrations calculées par le modèle. Durant ces deux semaines, les températures étaient très élevées ($> 35^{\circ}\text{C}$). Ces deux

observations seraient dues à des facteurs physiologiques des végétaux. En juin, avec les nouvelles pousses, les végétaux émettent peut-être plus d'isoprène. Après une semaine de canicule, les végétaux se dessèchent et ont tendance à refermer leurs stomates, ce qui réduit leur émission. La seconde explication serait due au mélange qui est plus ou moins important, à température maximale égale, selon la saison. L'ensoleillement varie entre juin, juillet et août mais pas au point d'expliquer les écarts observés en juin qui sont d'un facteur 2 pour les émissions. Dans le modèle de Guenther et al. [1995], la relation liant le flux de *photosynthetically active radiation* (PAR) aux émissions ne varie pas d'un facteur 2. Ainsi le coefficient k serait dépendant d'autres facteurs comme l'humidité du sol ou l'albédo. Pour notre étude, le modèle de Guenther sera utilisé avec les mêmes paramètres durant tout l'été 2003 mais l'approche empirique qui précède tend à montrer que le modèle d'émissions biogéniques sous-estime les émissions biogéniques en juin par fortes températures ($> 30\text{ }^{\circ}\text{C}$).

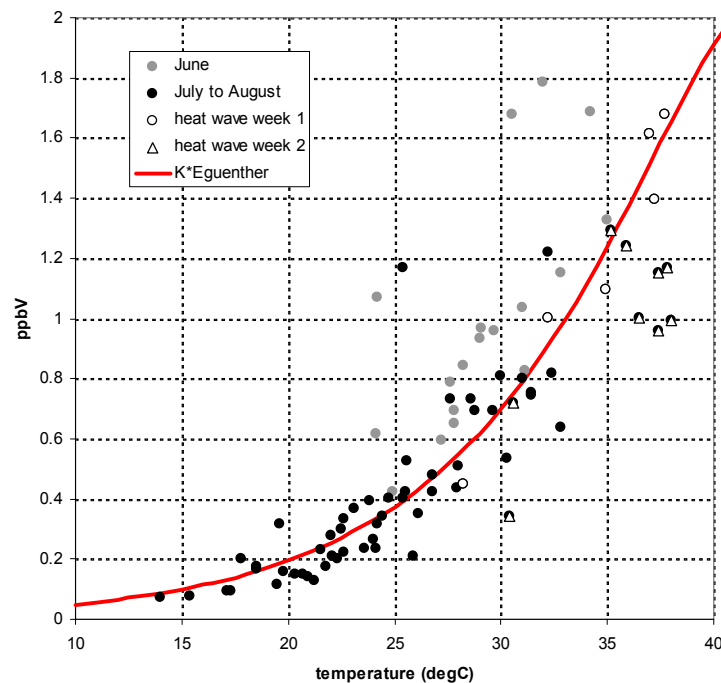


Figure 6-7. Concentration en isoprène mesurée à 17 heures HL en fonction de la température à 2 mètres à 17 HL mesurée à la station de Champagnier durant l'été 2003. La courbe rouge correspond à une adaptation du modèle de Guenther et al. [1995]

Simulation du cycle diurne des COV à Champagnier

Le calcul chimique Metphomod est validé à l'aide des données aux stations fixes de la cuvette grenobloise. La mesure de la spéciation des COVNM réalisée à Champagnier à l'aide du chromatographe Perkin Elmer permet de connaître en un point la spéciation des COVNM dans l'atmosphère. Ce site est influencé par le pôle chimique du Pont-de-Claix et certains COVNM proviennent des procédés industriels utilisés sur le pôle. La figure 6-8 montre le

cycle diurne des grandes familles de COVNM décrit par RACM (alcane, alcène, aromatique biogénique) au site de Champagnier. Les cycles diurnes des alcanes et des alcènes de la figure 6-8 sont assez semblables aux cycles diurnes mesurés de la figure 6-6. Les concentrations en alcanes sont bien reproduites avec des concentrations élevées la nuit. Les concentrations en alcènes et en aromatiques sont sous-estimées. Les concentrations en COVB simulées à Champagnier sont composées à plus de 95 % d'isoprène pendant la journée, lorsque l'émission d'isoprène par la végétation a lieu. Pendant la nuit, lorsque l'isoprène n'est pas émis (partie 2.6), les concentrations en COVB sont nulles. Si le maximum de COVB (et donc d'isoprène) est bien reproduit à 17 h HL, la simulation avec le modèle de Guenther décrit plus haut (courbe « biogéniques simulation de base » sur la figure 6-6) fait apparaître un large pic le matin du à l'accumulation des émissions d'isoprène simulées dans la couche de surface du modèle. Ce pic disparaît lorsque le mélange s'opère à partir de 7 h TU (soit 9 h HL). Etant donné que le modèle fournit de bonnes estimations des concentrations pour les autres espèces dans la couche stable matinale, l'erreur provient de la simulation des émissions. Le modèle d'émission utilisé semble émettre de l'isoprène trop tôt. L'émission d'isoprène durant la matinée et tout au moins avant la destruction de la couche de surface stable semble très limitée dans la réalité.

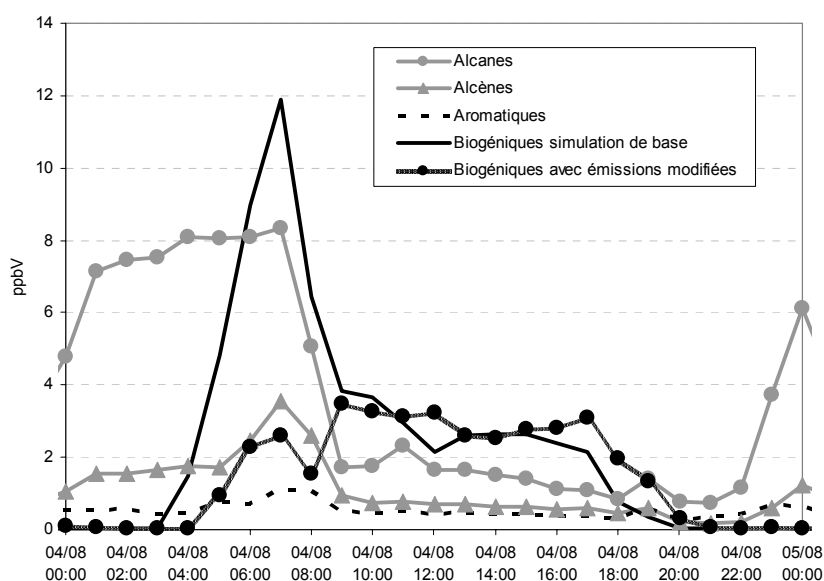


Figure 6-8. Cycle diurne simulé de différentes familles de COV simulé au site de Champagnier le lundi 4 août 2003 (heure TU)

Le modèle de Guenther et al. [1995] calcule l'émission en fonction de la température du feuillage et le flux PAR (*Photosynthetically Active Radiation*). Dans notre calcul, en l'absence de température de feuillage en sortie de MM5, nous utilisons en première approximation la température à 2 mètres calculée par MM5 pour le calcul. Le flux de PAR est calculé à partir de l'angle zénithal du soleil (voir partie 2.6 pour le calcul). Aussi, de nombreuses feuilles dans la canopée ne reçoivent pas directement la radiation solaire directe et ne s'échauffent pas

aussi vite que les feuilles au sommet du feuillage. Dans le cadre de l'expérience ESCOMPTE, le modèle que nous employons décrivait de manière satisfaisante ($r^2 = 0,82$) les données de flux d'isoprène collectées au site de Montmeyan (voir partie 3.2) [Simon, Dumergues, Bouchou, Solignac, and Torres, 2005]. Le facteur d'émission (ER) calculé par Simon et al. [2005] à l'aide du modèle de Guenther et al. [1995] est représenté sur la figure 6-9.

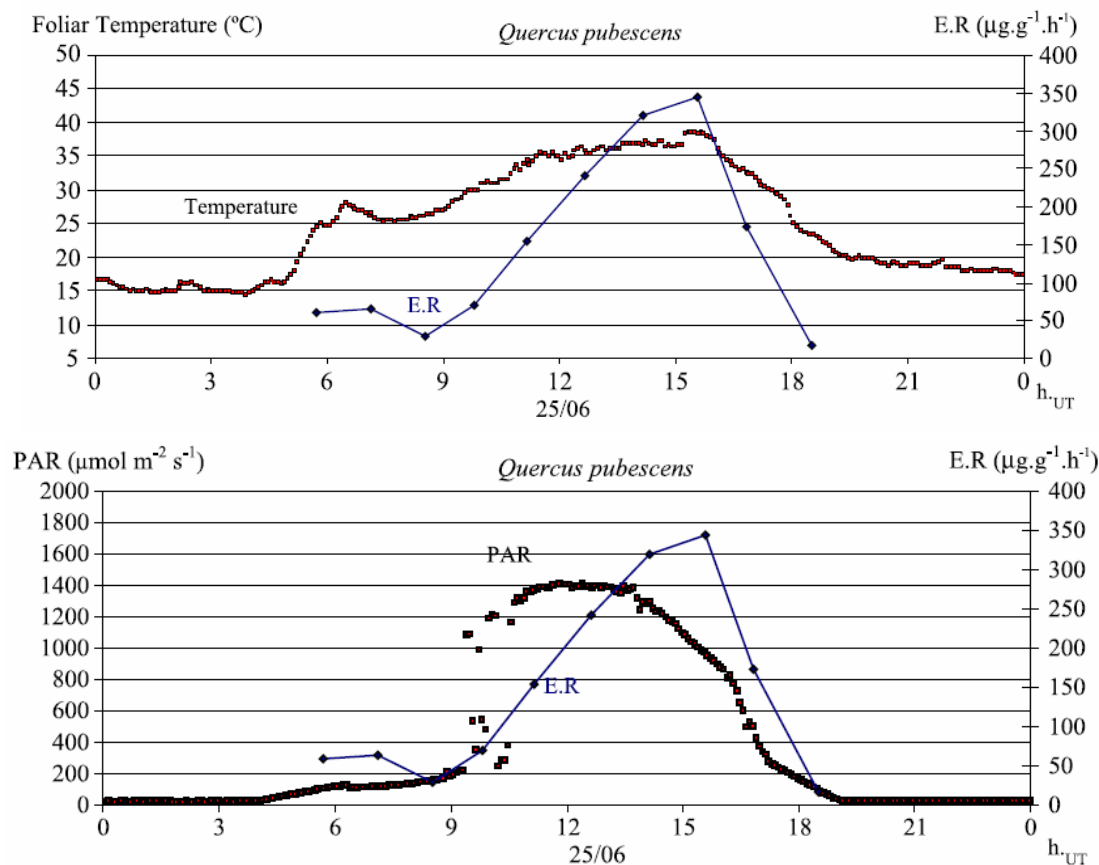


Figure 6-9. Variations de la température foliaire et du flux PAR (*Photosynthetically Active Radiation*) mesurées le 25 juin 2001 au-dessus d'une forêt de *quercus pubescens* extrait de [Simon, Dumergues, Bouchou, Solignac, and Torres, 2005]

Le profil de température foliaire mesuré le 25 juin 2001 présente un pic matinal entre 6 h et 7 h TU puis un minimum à 8 h TU (figure 6-9). Le maximum de température est mesuré à 16 h TU. Il fait bien intervenir un minimum de ER entre 8 h et 9 h. Ces variations de la température foliaire semblent très liées au vent qui s'est mis en place à 8 h TU le 25 juin. Le flux de PAR est faible jusqu'à 9 h TU, ensuite il augmente très rapidement jusqu'à un seuil de $1400 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$. Le flux de PAR contrôle la valeur de ER jusqu'à 9 h TU puis c'est la température foliaire qui fixe la valeur de ER. Pour notre calcul, la valeur de PAR est dérivée de l'angle zénithal. En observant les variations de flux de PAR de la figure 6-9, cette approche ne semble pas correcte dans la matinée puisque dans notre modèle le PAR est surestimé dans la matinée, avant 9 h TU.

Afin de connaître l'impact d'une telle erreur, le calcul du flux de PAR dans le module de calcul des émissions biogéniques est modifié. Dans le calcul présenté à la partie 2.6, on fixe le flux à $100 \mu\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ pour les heures de la journée avant 10 h HL. A partir de 10 h HL, le calcul est inchangé. La courbe « biogéniques avec émissions modifiées » de la figure 6-8 montre qu'avec ce calcul, le pic matinal simulé dans le cas de base disparaît et l'évolution diurne de l'isoprène dans l'air correspond mieux aux mesures de la figure 6-6. La comparaison du modèle avec les mesures a montré que le modèle de calcul du flux de PAR surestimait de façon notable les émissions de COVB dans la matinée. Un calcul de flux de PAR adapté à des mesures réalisées lors de la POI 2 d'ESCOMPTE apporte de meilleurs résultats par comparaison à un point. A présent, il est difficile de savoir si ce point de mesure est représentatif du reste de la vallée. On émet en particulier de fortes doutes sur la validité du calcul de PAR sur des versants avec des orientations différentes. La figure 6-10 montre que le site de Champagnier est situé sur un plateau entouré de versants boisés avec diverses orientations et les cycles diurnes du flux de PAR sont certainement différents d'un versant à l'autre.

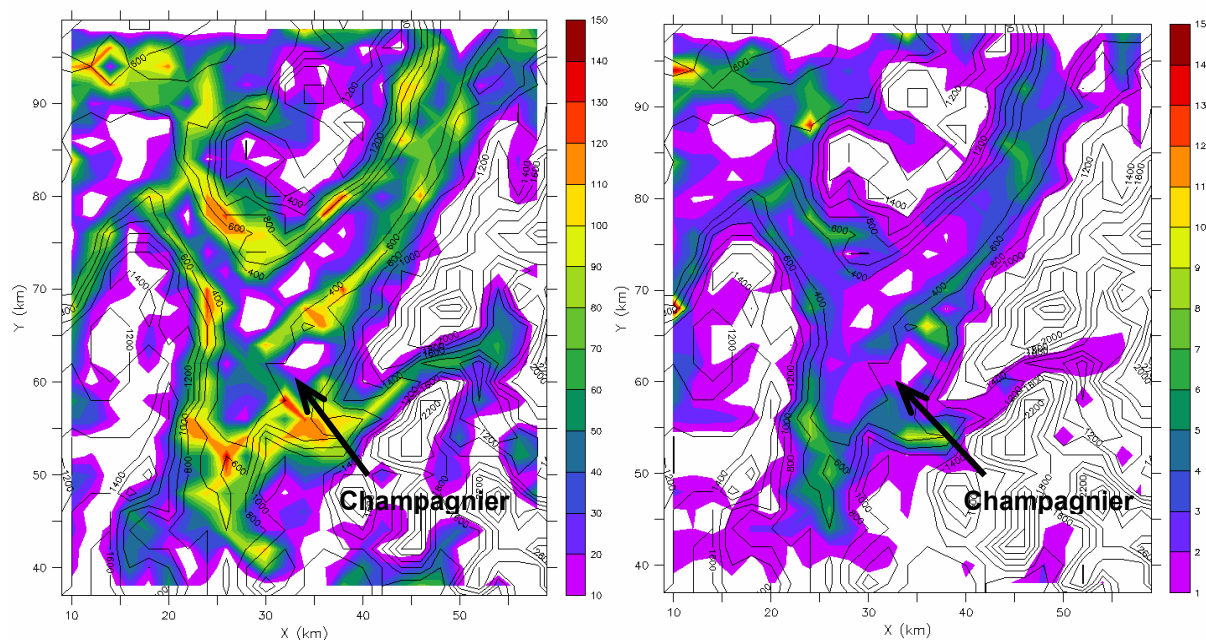


Figure 6-10. Emissions instantanées d'isoprène ISO (en $\text{mol km}^{-2} \text{h}^{-1}$) le 3 août 2003 entre 16 h et 17 h de (gauche) et concentration en isoprène ISO (en ppbV) le 3 août 2003 à 17 h HL (droite)

Les émissions d'isoprène calculées par le modèle sur ce plateau sont faibles car l'occupation du sol est surtout liée à l'agriculture. Les résultats du modèle d'émissions biogéniques et de Metphomod à 17 h HL le 3 août 2003 montrent que l'isoprène dans l'air se trouve en grande quantité à proximité des sources. Les émissions simulées par le modèle dépassent $100 \text{mol km}^{-2} \text{h}^{-1}$ sur les versants boisés alors que les concentrations au sol atteignent 10 ppbV à 17 h HL sur ces mêmes versants. Cette hétérogénéité des concentrations au sol s'explique par le

fait qu'à 17 h HL, le mélange des polluants est très important et que l'isoprène réagit très vite après son émission. Le flux de PAR dépend fortement de l'eau liquide présente sur les feuilles des végétaux. Le fait de prendre en compte l'évaporation de l'eau à la surface des feuilles permettrait d'obtenir des flux de PAR et des profils d'émission de COVB dans le temps plus réalistes. L'effet d'ombrage a certainement un effet important sur les émissions de COVB puisqu'il modifie de manière importante la valeur du flux de PAR. Ces effets sont surtout observés le matin et en fin d'après-midi mais pas lors du maximum d'émissions de COVB par la végétation vers 17 HL. Les émetteurs de terpènes sont moins sensibles au flux de PAR que les espèces émettant de l'isoprène et les incertitudes sur les profils temporels d'émission pour les terpènes sont certainement moins grandes. De nombreux autres facteurs que la température ou le flux de PAR peuvent intervenir dans les émissions de COVB et comme la partie 2.6 l'a souligné, les incertitudes sur ce calcul sont très importantes.

Conclusion : impact sur la photochimie

L'impact des émissions biogéniques sur la photochimie est sensible dans le panache d'ozone de l'agglomération grenobloise. Une simulation en l'absence d'émissions de COVB montre que certaines zones du domaine de calcul sont plus sensibles que d'autres. La figure 6-11 montre que les deux zones fortement influencées par les émissions biogéniques sont le sud de l'agglomération grenobloise et la basse vallée du Drac. Dans ces zones, les émissions biogéniques sont responsables de 10 % de l'ozone simulé au sol. Les mécanismes chimiques responsables des valeurs simulées sont différents selon la présence ou non d'émissions de NO.

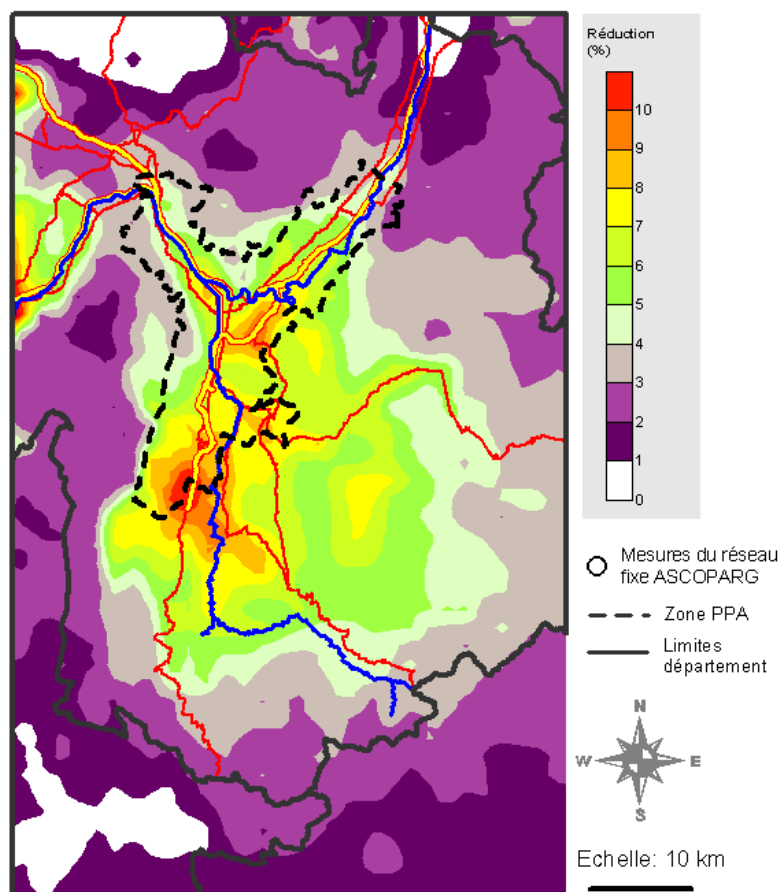


Figure 6-11. Pourcentage de réduction de la moyenne des pics d'ozone moyens simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA sans émissions de COVB

Un doublement des émissions biogéniques aboutit à une augmentation de $10 \mu\text{g m}^{-3}$ en moyenne des maximums d'ozone dans le panache du 1^{er} au 7 août 2003 (figure 6-12). On remarque que le doublement des émissions a peu d'impact dans le reste du modèle, notamment dans les régions montagneuses (Vercors et Belledonne). En revanche, les concentrations d'ozone augmentent dans le massif de la Chartreuse puisque ce massif est souvent sous l'influence de la couche réservoir d'ozone.

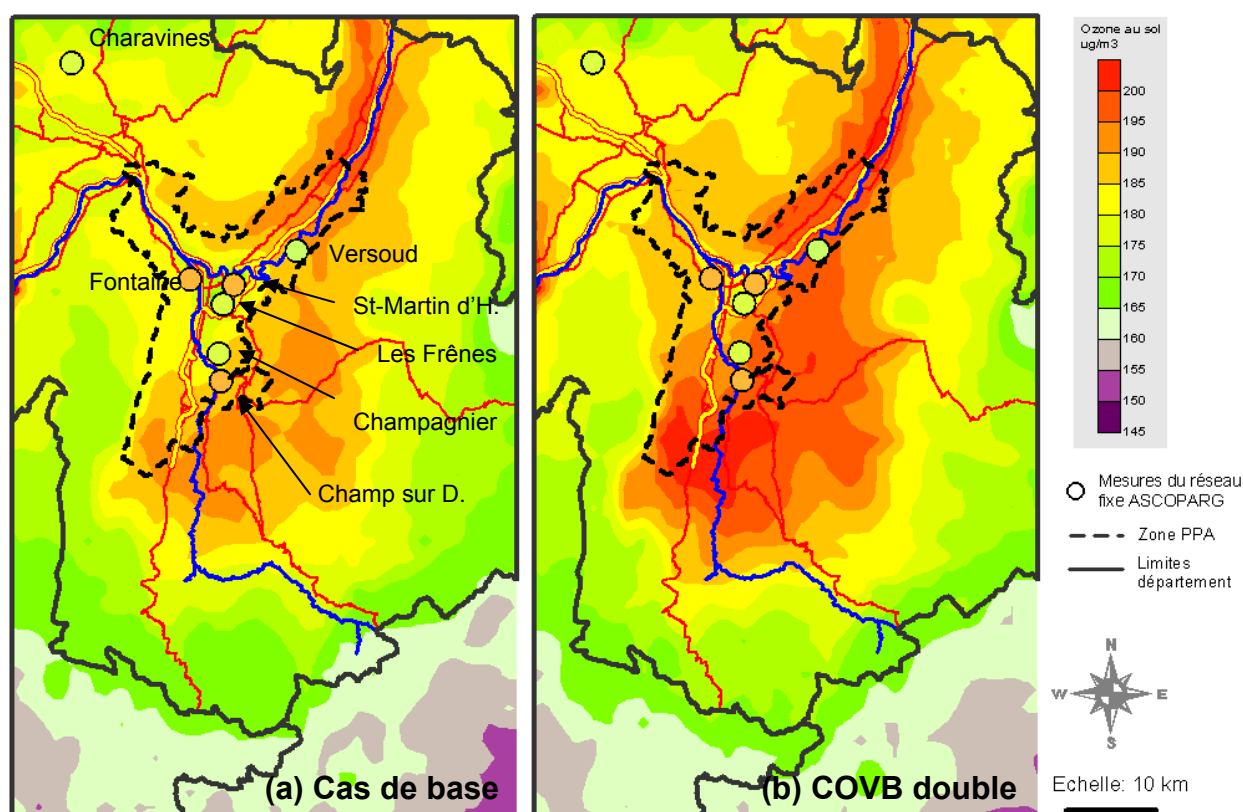


Figure 6-12. Moyenne des pics d'ozone simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA (échelle de couleur) et mesurés (points) pour le cas de base (a) et le doublement des émissions biogéniques (b)

On a vu dans les chapitres 3 et 4 que l'ozone injecté au sein de cette couche durant la journée était transporté par un léger courant de sud en altitude vers les sommets chartroussins. L'impact des sources biogéniques sur les maximums d'ozone dans le panache reste limité puisque le régime de production de l'ozone dans la zone au sud de l'agglomération possède un régime de production de l'ozone limité par les NO_x . L'impact des émissions de COVB est ressenti à proximité des sources et tend à limiter la titration de l'ozone par le NO.

Au vu de la comparaison avec les mesures de la figure 6-12, il semble que la simulation avec le doublement des émissions de COVB apporte de meilleurs résultats à certaines stations comme celle de Fontaine mais dans l'ensemble, les pics d'ozone semblent surestimés.

6.4. Impact de l'humidité du sol et de la canopée sur le développement de la CLC et la photochimie

Les teneurs en eau du sol et de la canopée ont un impact important sur la dynamique car ces variables ont un impact direct sur les flux de chaleur et de masse (d'eau essentiellement) entre le sol et l'atmosphère. Les paramètres du sol et la canopée dont dépendent les flux de chaleur et de masse sont la capacité calorifique et la diffusivité thermique du sol qui régissent les transferts thermiques dans le sol, la rugosité des éléments du sol qui contrôle la turbulence atmosphérique au sein de la couche de surface et l'humidité qui contrôle le flux de masse entre le sol et l'atmosphère. L'humidité du sol joue également un rôle sur la capacité calorifique des sols puisque la présence d'eau dans un sol va augmenter sa capacité calorifique et ralentir son échauffement. Le développement de la CLC est très dépendant du flux de chaleur sensible puisque c'est ce flux qui va échauffer les couches d'air en contact avec le sol et créer les thermiques responsables du développement de la CLC. Or, plus le sol et la végétation sont humides et plus le flux de chaleur latent va être important en regard du flux de chaleur sensible. En conséquence, plus un sol est humide et plus le développement la CLC est retardé dans le temps et limité en hauteur.

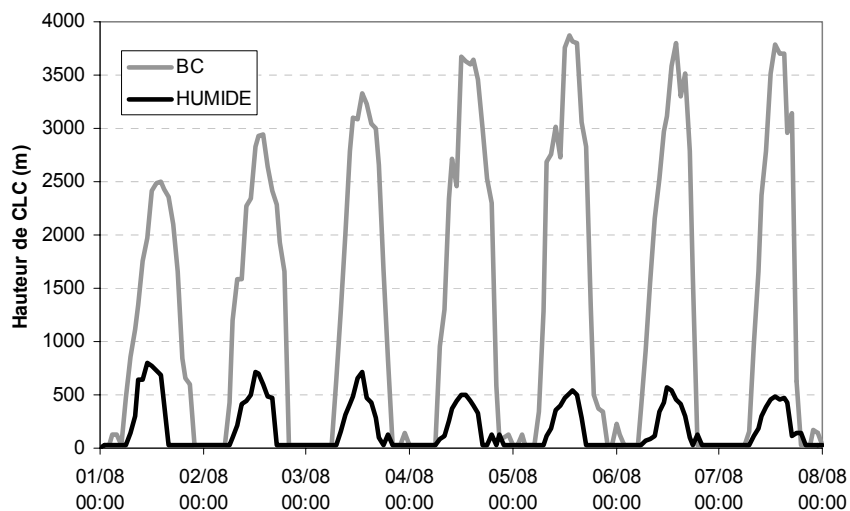


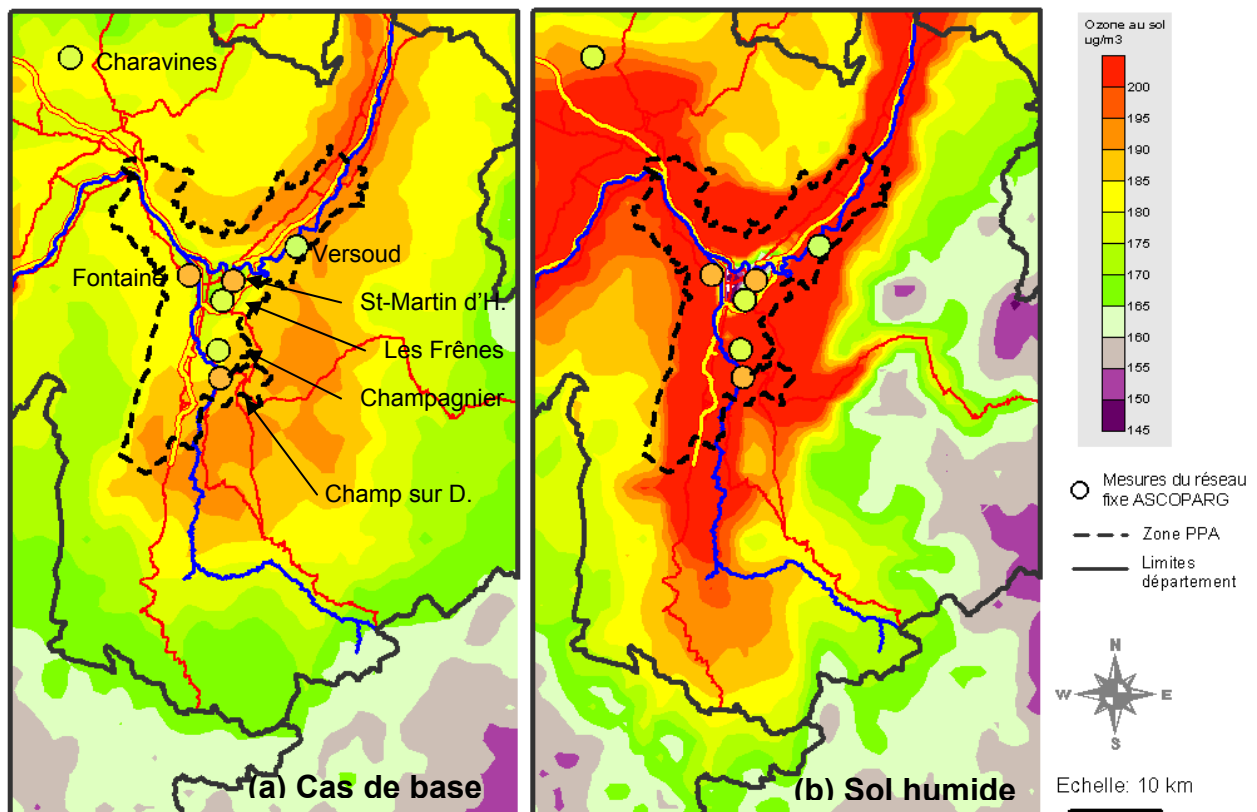
Figure 6-13. Hauteur de la CLC au-dessus du site de Grenoble les Frênes pour le cas de base et pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3,7 K à 0 m asl)

Nous proposons dans cette partie d'illustrer cet impact du sol sur la CLC avec une simulation réalisée dans les mêmes conditions météorologiques pour l'atmosphère que la semaine du 1^{er} au 8 août 2003 mais en maintenant artificiellement le sol humide. Dans le modèle Metphomod, cela revient à fixer une humidité relative dans les pores du sol à 100 % et une teneur en eau des végétaux élevée, 50 % dans notre simulation. On a vu dans la partie 4.1 que la hauteur de la CLC avait un fort impact sur la distribution verticale de l'ozone. Le fait que la

CLC se développe moins haut à un effet sur le mélange des polluants et va modifier la production d’ozone au sein de la CLC.

Impact de l’humidité du sol sur la CLC et la production d’ozone

Le fait de fixer l’humidité à une valeur très élevée conduit à un développement de la CLC très limité et irréaliste (figure 6-12). Durant la journée, la CLC atteint au maximum une hauteur de 500 m, alors que dans la simulation de base, elle dépasse 3500 m. En plus de limiter le développement de la CLC, le sol humide va empêcher la mise en place du système de vent de vallée. Les polluants émis restent à proximité des sources. La production d’ozone est donc concentrée dans le fond de la vallée. La faible dilution de l’ozone par le vent de vallée va conduire à des maximums d’ozone très importants pour les 7 jours de simulation comme le montre la figure 6-13. La figure montre que l’ozone reste contenu dans le fond de vallée où les pics journaliers moyens dépassent $200 \mu\text{g m}^{-3}$. De telles situations sont irréalistes puisqu’une telle humidité ne peut pas être observée en période estivale. Cette situation a néanmoins permis de montrer que la hauteur de la CLC et la présence du vent de vallée étaient deux paramètres déterminants pour la production d’ozone locale.



Conclusion

Cette simulation, bien que peu réaliste, a montré que l'humidité du sol avait un rôle déterminant dans le développement de la CLC. L'humidité contenue dans le sol va retarder le développement de la CLC, dans notre cas de 1 à 2 heures suivant les journées. Ce retard va permettre aux émissions de NO_x de s'accumuler plus longtemps dans la couche de surface et de rester à proximité des sources. L'humidité dans les végétaux joue un rôle identique mais participe de manière moins importante à ce phénomène. La présence de rosée ou de brouillards matinaux semble, au regard de ces résultats, un paramètre important à prendre en compte. On a montré dans la partie 3.1 que la vallée du Grésivaudan avait une circulation différente des autres vallées à cause de l'humidité de ses sols et que le développement de la CLC semblait y être ralenti. Comme stipulé plus haut dans le manuscrit, le développement de la CLC a un impact très important sur la production d'ozone en son sein. Le fait que le modèle décrive mal certains phénomènes très locaux, comme la présence de rosée ou de brouillard, va induire des erreurs importantes sur la production d'ozone

6.5. Conclusions et perspectives

Cette étude de sensibilité a montré que certains paramètres d'entrée du modèle ont un impact très important sur le développement de la CLC et sur la production d'ozone en son sein. L'étude de plusieurs cas a permis d'évaluer des incertitudes liées à une augmentation de 3 K de la température de l'atmosphère lors d'un événement pollué extrême (canicule). Une telle augmentation de température conduirait à Grenoble à une augmentation de 10 % des maximums journaliers d'ozone. Selon le modèle, la teneur en eau du sol et de la canopée semble jouer un rôle déterminant sur la dynamique des vallées. L'assèchement du sol en début de journée va retarder le développement convectif et ainsi limiter la hauteur de la CLC. On a vu que dans le cas de CLC très développées comme c'est le cas en août 2003, la production d'ozone à Grenoble était estimée à 30 à 40 % de l'ozone total dans le panache de l'agglomération et l'ozone restant était importé de l'extérieur de la vallée lors du développement de la CLC. Pour des hauteurs de CLC plus faibles, la production d'ozone est plus locale et l'ozone est moins dilué, la production locale peut être alors plus élevée. Le développement du vent de vallée montant est également dépendant de la teneur en eau du sol et de son assèchement pendant la journée.

La teneur en eau du sol est un paramètre déterminant qui nécessite d'être mieux pris en compte dans un modèle local comme Metphomod. En effet, la paramétrisation de la teneur en eau du sol dans Metphomod est très simplifiée. Cette approche est néanmoins pratique car elle permet au modélisateur de fixer facilement une teneur en eau et ainsi de la contrôler. Ceci

évite les dérives introduites par une mauvaise description des processus hydrologiques dans le sol. Des recherches plus poussées couplées à des observations *in situ* en plusieurs sites de la région grenobloise représentatifs d'un terrain (fond de vallée urbain, fond de vallée rural, versant boisé, versant nu) conduiraient à mieux maîtriser l'impact de l'hétérogénéité des terrains sur le développement de la CLC.

D'autres paramètres induisent des erreurs importantes sur le calcul du mélange au sein de la CLC par le modèle. Parmi ceux-ci, on en citera deux, propres au terrain montagneux et qui ont déjà été évoqués dans ce manuscrit. Le premier est l'effet d'ombre créé par les reliefs qui va retarder le développement de la CLC le matin et accélérer la création de la couche de surface stable en soirée. Cet effet est variable selon l'orientation du versant et la présence de massifs montagneux dans la direction du soleil. Le second est la formation des cumulus de pente qui ralentissent le développement de la CLC sur les versants durant l'après-midi ou dès la mi-journée. Pour le moment, il est difficile de quantifier l'importance de ces phénomènes sur la vitesse de développement ou la hauteur de la CLC. Si des modules traitant de l'ombre dans les modèles eulériens ont fait leur apparition ces dernières années, la création de nuages de type cumulus dans les modèles est liée à de nombreuses incertitudes. Ces deux points seraient évidemment à développer dans le cadre d'une modélisation plus poussée de la description de la CLC en région montagneuse.



**Chapitre 7. Un cas de forte intrusion d’ozone
stratosphérique dans les Alpes en juillet 2004**

Dans les chapitres précédents, on a montré à plusieurs reprises comment les échelles régionales et locales interagissaient. Les fronts de vent de vallée sur le site grenoblois et les fronts de brise de mer sur le site d’ESCOMPTE sont des exemples de circulations générées par le relief et les hétérogénéités de sol. Ces circulations complexes ont un grand impact sur la photochimie comme l’ont montré les chapitres 3 et 4. Le dernier chapitre de cette thèse va décrire, à une beaucoup plus grande échelle, un processus qui joue un rôle important dans la chimie de la troposphère libre et qui a une influence significative à l’échelle locale des vallées alpines.

7.1. Problématique des STE et observations dans les Alpes en juillet 2004

Le temps de résidence de l’ozone dans l’atmosphère est de quelques heures dans la couche limite atmosphérique (CLA) et de plusieurs jours dans la troposphère libre (TL). Sa forte réactivité, due à son pouvoir oxydant, l’empêche d’être présent de manière homogène dans la troposphère contrairement à d’autres espèces comme le CO₂. Les variations locales de la concentration sont dues à trois mécanismes. Le premier qui est presque négligeable au regard des autres est la foudre. Le second est la production d’ozone par des réactions photochimiques de précurseurs émis par des sources biogéniques ou anthropiques dans la CLA. La troisième source correspond aux échanges entre la stratosphère et la troposphère (STE) qui transportent l’air riche en ozone de la stratosphère au sein de la troposphère. L’impact relatif des deux derniers mécanismes sur le budget de l’ozone dans la troposphère est mal connu. Prather et Ehhalt [2001] estiment entre 400 et 1400 Tg an⁻¹ le flux d’ozone à travers la tropopause. Une estimation du budget d’ozone est souvent basée sur des mesures et des modèles de type GCM. [Langmann, Bauer, and Bey, 2003] ont fourni une estimation de la participation de l’ozone global dans la CLA en Europe basée sur des simulations à l’aide de modèles emboîtés. L’ozone global est responsable selon eux de 5 à 10 ppbV de la concentration d’ozone mesurée l’après-midi à la surface. Stohl et al. [2000], en utilisant des mesures à des sites alpins d’altitude et le modèle de dispersion lagrangien FLEXPART alimenté par les analyses ECMWF, a montré que les intrusions stratosphériques jouaient un grand rôle dans les concentrations d’ozone en altitude dans les Alpes avec un maximum d’intrusions à la fin de l’hiver et au début du printemps et un minimum durant l’été. Après avoir pénétrer la troposphère, les masses d’air riches en ozone forment des filaments, s’étirent et se mélangent [Stohl, Eckhardt, Forster, James, and Spichtinger, 2002]. Durant ces processus, les masses d’air perdent leur signature stratosphérique (ozone élevé, humidité relative faible) et peuvent pénétrer la CLA où l’ozone stratosphérique est alors parfaitement mélangé à l’ozone troposphérique.

L’ozone originaire de la basse stratosphère affecte souvent la haute troposphère mais l’impact de cet ozone sur la basse troposphère et la CLA est mal connu puisque plus l’ozone approche la surface de la Terre, plus le mélange est important et plus cet ozone est difficilement identifiable. Aussi, les intrusions stratosphériques sont suspectées de jouer un rôle dans certaines mesures réalisées dans la CLA comme l’ont montré San José et al. [2005] à Madrid. Tulet et al. [2002], en utilisant un modèle mésoéchelle, ont montré que dans des conditions convectives, l’ozone de la haute troposphère peut affecter les concentrations à la surface jusqu’à 30 ppbV. Des niveaux très élevés d’ozone à la Jungfraujoch ont été observés durant toute la journée du 5 mai 1987. Ces fortes concentrations, qui ont atteint 97 ppbV au maximum de l’épisode, ont été attribuées à l’effet combiné d’une intrusion d’ozone depuis la tropopause et du transport d’air provenant de la CLA (avec un possible apport d’ozone produit au sein de la CLA) [Schuepbach, Davis, and Massacand, 1999].

Tableau 7-1. Localisation des stations sol utilisées pour caractériser l’intrusion stratosphérique

Site	Longitude (°)	Latitude (°)	Altitude (m)
Chamonix centre ville	6,873	45,923	1035
Chamonix Lognan (terminal téléphérique)	6,943	45,969	1973
Chamonix Grands Montets (terminal téléphérique)	6,960	45,940	3295
Jungfraujoch	7,987	46,547	3580
Zugspitze	10,983	47,417	2960
OHP	5,713	43,9311	670

Les mesures disponibles aux deux sites d’altitude des Grands-Montets (3295 m) et du Jungfraujoch (3580 m), on se reportera au tableau 7-1 et à la figure 7-1 pour leur localisation, ont enregistré des concentrations en ozone élevées dans la nuit du 26 au 27 juin 2004. Les maximums observés étaient pour ces deux stations respectivement 125 ppbV et 92 ppbV.

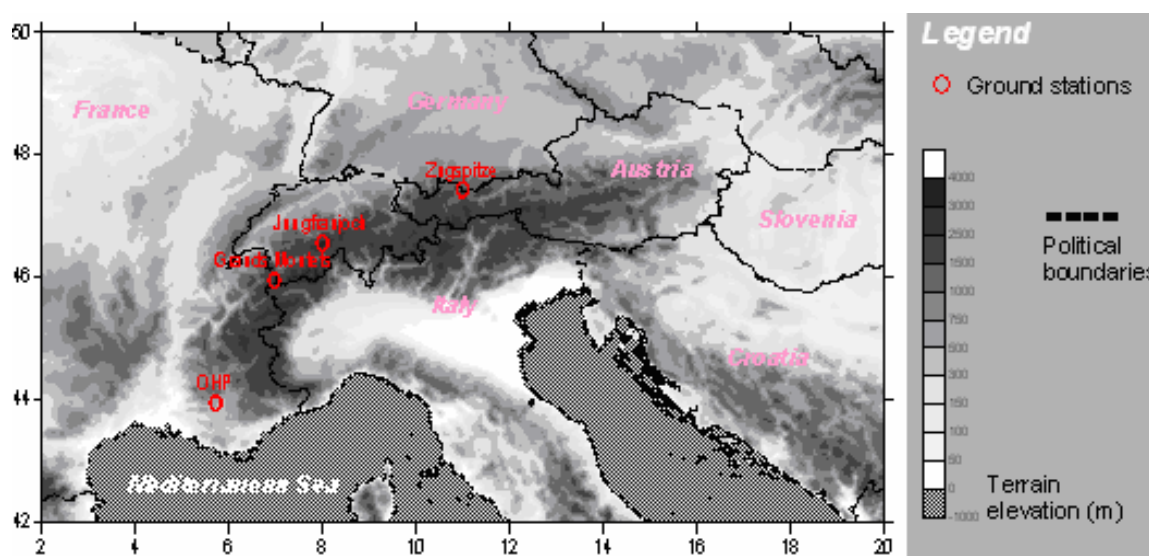


Figure 7-1. Carte des Alpes avec les stations sol utilisées pour caractériser l’intrusion d’ozone

A la station du Jungfraujoch, qui dispose d’une mesure d’humidité, l’air riche en ozone était très sec ($HR < 10 \%$). Les deux stations ont enregistré ces pics d’ozone à 22 TU. Ces concentrations en ozone sont caractéristiques des valeurs mesurées dans les panaches d’ozone des grands centres urbains en été lors d’épisodes très pollués. A ce jour, la valeur de 92 ppbV est la concentration en ozone la plus élevée mesurée à la Jungfraujoch depuis 1995. En partant de ces observations, il est intéressant de déterminer si cet apport d’ozone sur le relief est du à un effet de mélange au sein de la CLA ou si les masses d’air détectées aux Grands-Montets et à la Jungfraujoch sont restées dans la TL sans se mélanger à l’air de la CLA.

Dans une première partie, l’intrusion stratosphérique est caractérisée à l’aide des mesures disponibles en surface et en altitude. Ensuite, la modélisation est utilisée pour caractériser l’intrusion dans la basse troposphère avec deux modèles : le modèle eulérien MOZART (Horowitz et al., [2003]) et le modèle lagrangien FLEXPART (Stohl et al., [1998]). Les approches eulérienne et lagrangienne sont évaluées sur la base des mesures disponibles. Dans une dernière partie, la chaîne de modèles PREVALP est utilisée pour évaluer l’apport d’ozone provenant de cette intrusion dans la CLA au-dessus du relief alpin. L’impact sur la photochimie de cet ozone stratosphérique est déterminé en introduisant d’abord l’ozone stratosphérique à l’aide d’un traceur passif puis à l’aide d’ozone réactif qui se mélange à l’ozone présent dans la TL et dans la CLA.

7.2. Caractérisation de l’intrusion en utilisant des mesures

Mesures sol

La vallée de Chamonix (France) est une vallée alpine très étroite puisque le fond de la vallée est situé à 1200 m en moyenne alors que le sommet Mont-Blanc est situé à 10 km du fond de vallée et culmine à 4810 m. Durant l’été 2004, trois analyseurs d’ozone de type O341M de marque Environnement SA ont été installés sur trois sites de la vallée à différentes altitudes : deux sur le versant nord-ouest de l’Aiguille Verte et un au centre ville de Chamonix dans le fond de la vallée (voir tableau 7-1 pour l’altitude des stations et leurs coordonnées géographiques). La répartition des analyseurs à différentes altitudes visait à établir des profils d’ozone dans la vallée. Les mesures d’ozone à la station de Lognan de la figure 7-2 sont caractéristiques d’un site d’altitude avec un niveau de fond de 55 ppbV le 27 juillet. A ce site, la concentration d’ozone reste élevée durant la nuit ce qui montre, qu’à cause de l’absence de végétation, la déposition sèche est négligeable. Le site n’est pas influencé la nuit par des sources de NO. Durant la journée, on remarque de légères augmentations de l’ozone d’amplitude 15 ppbV ($30 \mu\text{g m}^{-3}$) entre 12 h et 18 h TU (14 h et 20 h HL). Ces augmentations sont dues à la production d’ozone dans la vallée sous des conditions relativement ensoleillées (figure 7-3). Selon les mécanismes décrits dans le chapitre 3 pour Grenoble, l’ozone produit à

partir des précurseurs dans la vallée est injecté en altitude par les vents de pentes et les thermiques. Cette production d’ozone correspond à la production évaluée par simulation numérique pour juillet 2003 dans [Chaxel, Chollet, Brulfert, and Chemel, 2005].

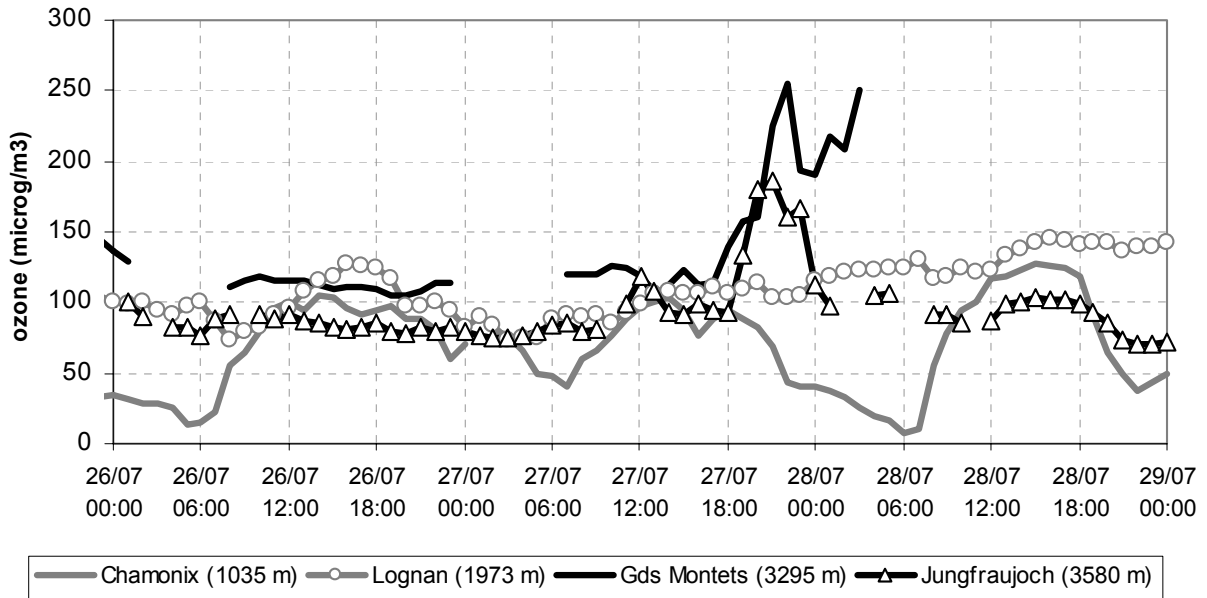


Figure 7-2. Concentrations en ozone mesurées à différentes stations les 27 et 28 juillet 2004

La station de Chamonix centre est représentative d’une station urbaine et montre que la titration de l’ozone par le NO, émis essentiellement par le trafic, contrôle les concentrations d’ozone tout au long de la journée. Les concentrations d’ozone mesurées au maximum de production, vers 15 h TU, sont inférieures de 20 ppbV (40 µg m⁻³) aux concentrations mesurées à Lognan. Ces observations montrent que l’ozone produit dans la vallée est détruit dans le centre de Chamonix [Brulfert, Chemel, Chaxel, and Chollet, 2005]. Ce phénomène caractéristique des centres urbains a été simulé dans d’autres vallées alpines comme l’ont montré les chapitres 3, 4 et 5. La station du terminal du téléphérique des Grands Montets est située dans la TL le 26 juillet puisque aucune variation de l’ozone n’est observée ce jour-là. La concentration en ozone est de 55 ppbV le 27 juillet à 12 h TU. La concentration commence à augmenter à 17 h TU et atteint 125 ppbV à 22 h TU. Passé 22 h TU, les mesures ont été invalidées à cause du mauvais fonctionnement de l’analyseur. Lors de la mesure de ces concentrations élevées, les analyseurs à plus basse altitude n’ont pas détecté de changements de la concentration qui reste autour de 50 ppbV. Le 28 juillet, le fond en ozone commence à augmenter à la station de Lognan et la station de Chamonix mesure un maximum d’ozone plus important le 28 juillet que le 27 juillet. Cette augmentation est certainement due à la production d’ozone à l’échelle régionale et le transport de l’ozone produit dans la CLA vers la TL selon les mécanismes d’injection présentés aux chapitres 3 et 4. Le 28 juillet est une journée ensoleillée avec un développement nuageux sur les reliefs, dû à la convection très limitée (figure 7-3).

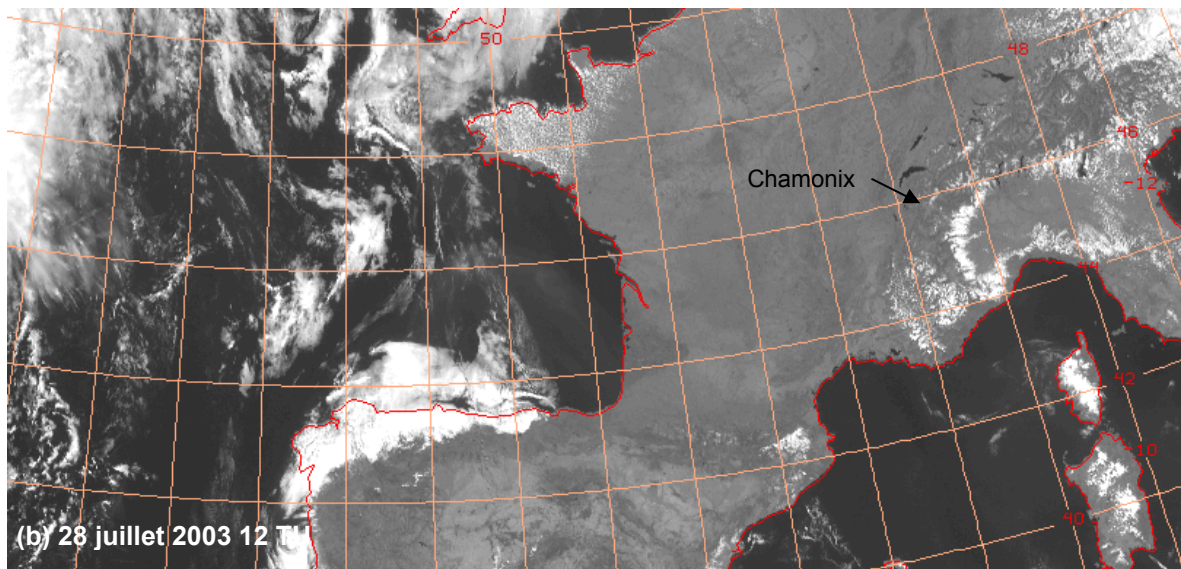
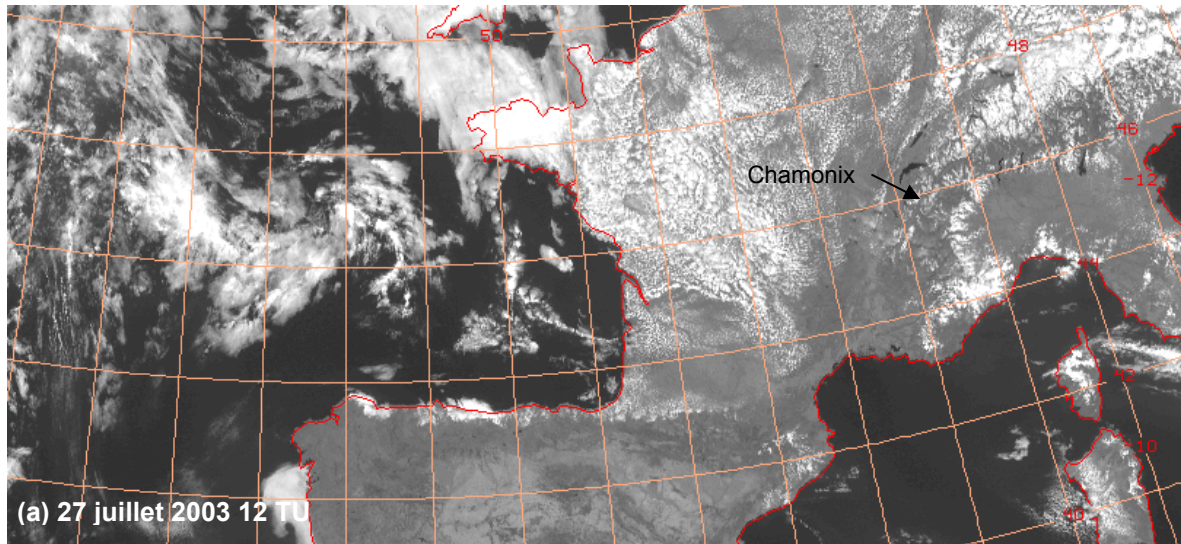


Figure 7-3. Images satellite METEOSAT dans le canal visible pour les 27 et 28 juillet 2004 à 12 TU

Ces observations ne sont pas suffisantes pour déterminer quelle est la cause des pics d’ozone nocturnes et il est nécessaire de collecter d’autres données. Des mesures d’ozone réalisées à la Jungfraujoeh (Suisse) les 27 et 28 juillet montre le même signal. La station de la Jungfraujoeh est située à 3580 m (voir figure 7-1 pour la localisation) au col entre le Mönch et la Jungfrau, deux sommets de plus de 4000 m. La figure 7-4 montre les mesures d’ozone, d’humidité et de particules totales en suspension (PTS) réalisées par l’office fédéral suisse pour l’environnement (BUWAL). Un pic d’ozone très étroit associé à des humidités basses ($< 10\%$) est présent sur les mesures dans la nuit du 26 au 27 juillet 2004. Ce pic a la même durée qu’à Chamonix, environ 5 heures, et a une amplitude de 45 ppbV, qui est inférieure à celle du pic mesuré aux Grands Montets. Ces observations prouvent que les deux sites ont été touchés par le même événement. Les mesures d’humidité de la figure 7-4 sont anticorrélées avec les mesures d’ozone. Juste avant ce pic d’ozone, l’air était très humide (HR = 95 %) et pauvre en

ozone ($[O_3] = 50$ ppbV). Dans les travaux de Stohl et al. [2000], les intrusions d’air stratosphérique à la Jungfraujoch sont détectées en utilisant les mesures d’ozone et d’humidité. Pour la Jungfraujoch, les auteurs stipulent qu’une signature stratosphérique est détectée pour des humidités inférieures à 30 % associées à une concentration en ozone supérieure de 10 % à la valeur moyenne mensuelle. Vu l’intensité du pic d’ozone et la faible humidité associée, la masse d’air qui a atteint la Jungfraujoch dans la nuit du 27 au 28 juillet a une signature stratosphérique très marquée. Les faibles niveaux de particules totales en suspension (PTS) mesurés sur le site écartent l’hypothèse selon laquelle le pic d’ozone nocturne pourrait avoir une origine liée à des processus liés à la CLA. Comme on l’a vu au chapitre 1, la présence de PTS est une signature de l’air provenant de la CLA.

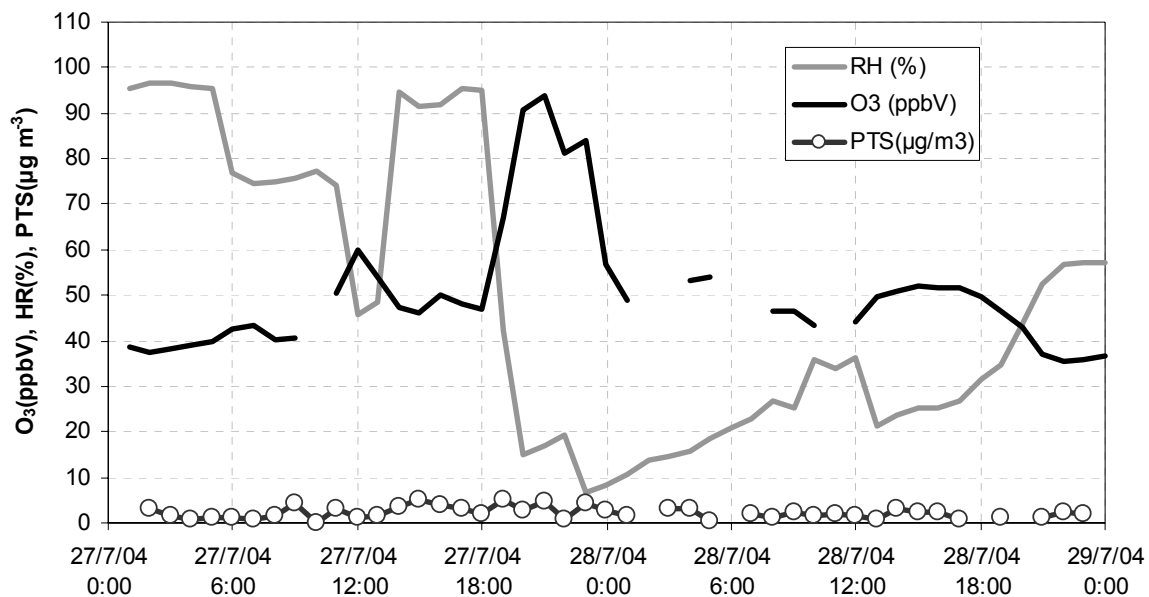


Figure 7-4. Séries temporelles pour l’ozone (ppbV), l’humidité relative (%) et les particules en suspension PTS ($\mu\text{g m}^{-3}$) à la Jungfraujoch le 27 et 28 juillet 2004

Peu de mesures en altitude sont disponibles dans les Alpes. En France, il n’existe pas de mesure de l’ozone en routine au-dessus de 3000 m. En Allemagne, la station du Zugspitze à 2960 m n’a pas mesuré de pic d’ozone dans la nuit du 27 au 28 juillet 2004. Cette station est située dans la partie est des Alpes (voir figure 7-1 pour la localisation). Des mesures réalisées à l’Observatoire de Haute-Provence (OHP) dans le cadre de la campagne ICARTT ont détecté un petit pic d’ozone entre 23 h et 5 h TU atteignant 78 ppbV. Cependant il est difficile de déterminer avec les mesures disponibles si la masse d’air à l’OHP dont l’altitude est 670 m avait une signature stratosphérique. En effet, l’OHP est influencé par la pollution photochimique de la région de Marseille et de l’étang de Berre lors de régime de brise de mer marqué. Cependant les observations présentées plus haut confirment qu’une intrusion à grande échelle a apporté de l’air riche en ozone sur les sommets des Alpes dans la nuit du 27 au 28 juillet 2004. Cette conclusion est importante car il est admis que les intrusions d’ozone

stratosphérique dans la basse troposphère sont très rares en été (Furger et al.,[2000], Stohl et al.,[2000]).

Mesures en altitude (sondages MOZAIC, LIDAR et vols avion)

ICARTT est un projet mené par un groupement d’équipes de recherche européennes et nord américaines et qui vise à mieux comprendre l’évolution de la qualité de l’air dans l’Atlantique Nord, en Europe et en Amérique du Nord. L’étude de la qualité de l’air passe par l’étude du transport intercontinental des polluants comme l’ozone. La campagne ICARTT a eu lieu durant l’été 2004 et de nombreuses mesures furent réalisées de chaque côté de l’Atlantique. Parmi les mesures réalisées lors d’ICARTT, les sondages MOZAIC (*Measurement of Ozone and Water Vapor by Airbus In-Service Aircraft*), les mesures LIDAR et les sondages d’ozone réalisés à l’OHP ont été mis à profit pour mieux caractériser l’événement.

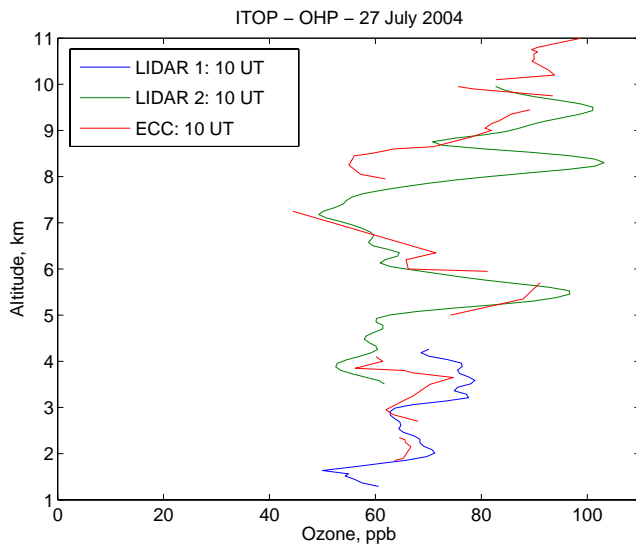


Figure 7-5. Mesures par LIDAR et par sonde O₃ ECC à la verticale de l’OHP (ppbV) le 27 juillet 2004 à 10 h TU (données IPSL/SA)

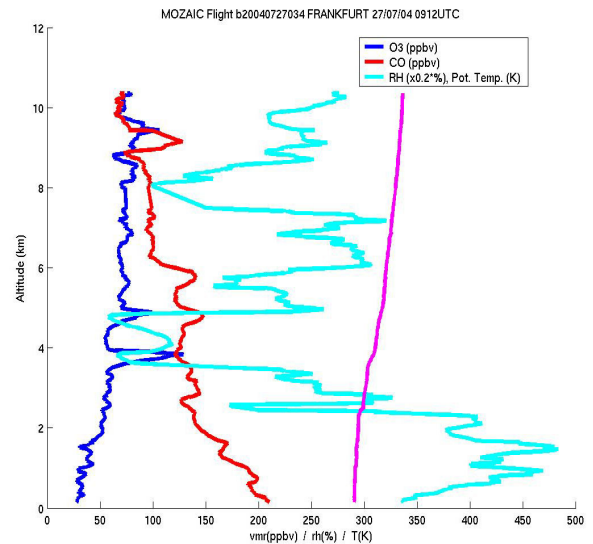


Figure 7-6. Sondage MOZAIC pour O₃, HR et CO au-dessus de Frankfurt le 27 juillet 2004 à 9:12 TU (données LA)

La figure 7-5 montre que les mesures par LIDAR et par sondage ECC réalisées à l’OHP ont détecté une couche riche en ozone entre 5000 et 6000 m avec des concentrations en ozone atteignant 100 ppbV le 27 July à 10 TU. La figure 7-6 présente les résultats du sondage MOZAIC réalisé au-dessus de Frankfurt le 27 juillet à 9h12 TU. Ce sondage a caractérisé deux fines couches distinctes à 3800 m et 4800 m d’altitude avec des concentrations en leur sein atteignant respectivement 140 et 100 ppbV. Ces fortes concentrations en ozone sont associées à des humidités relatives faibles, inférieures à 10 %. Ces couches détectées en altitude ont certainement un lien avec les mesures réalisées sur les sommets alpins.

7.3. Modélisation à grande échelle

La modélisation est utilisée pour déterminer la répartition de l’ozone dans la troposphère les 27 et 28 juillet 2004 et pour déterminer l’impact de l’intrusion d’ozone sur la photochimie dans la CLA en région alpine les jours qui suivirent l’intrusion. Afin de caractériser l’intrusion à l’échelle continentale, deux modèles sont utilisés. Le premier est le modèle de chimie-transport-climat (GCTM) MOZART dans sa version 2 (Horowitz et al., [2003]) et le second est le modèle de trajectoires FLEXPART (Stohl et al., [2005]). Les deux modèles ont été développés par des équipes participant à l’expérience ICARTT et sont utilisés dans le cadre de l’expérience pour analyser les mesures réalisées au jour le jour et prévoir des épisodes pollués à l’échelle de l’hémisphère nord. Ils sont donc parfaitement aptes à décrire les phénomènes mis en jeu lors d’intrusions de masses d’air stratosphériques dans la basse troposphère. L’étude des résultats de ces modèles va permettre de déterminer si leurs sorties peuvent être utilisées en entrée d’un modèle régional couplant la dynamique de l’atmosphère à la chimie réactive.

7.3.1. Approche lagrangienne avec le modèle FLEXPART

La formulation lagrangienne est utile pour décrire les intrusions stratosphériques car elle conserve relativement bien les structures en filament propres à ces intrusions. L’approche eulérienne à cause de la discrétisation des équations sur des grilles va introduire de la diffusion numérique et va lisser les gradients de concentration. FLEXPART est un modèle lagrangien calculant la dispersion des espèces gazeuses et leur déposition à la surface. FLEXPART est décrit par Stohl et al. ([1998;1999;2005],). Dans le cadre de ICARTT, le modèle FLEXPART a été utilisé dans de nombreuses configurations en appui aux équipes sur le terrain. Le modèle fonctionnait en prévision au cours de l’été 2004 et permettait de planifier les mesures et les vols des appareils instrumentés. Pour notre étude, FLEXPART est utilisé avec les champs en analyse ECMWF disponibles toutes les 6 heures. Ces champs sont les mêmes que ceux utilisés pour le calcul MM5 dans chaîne PREVALP. Le modèle est opéré au Laboratoire d’Aérologie à Toulouse (France) par l’équipe MOZAIC dirigée par Jean-Pierre Cammas. Jérôme Brioude réalisa les simulations FLEXPART pour cet épisode afin d’interpréter les sondages MOZAIC réalisés au cours de la campagne ICARTT.

Dans FLEXPART, des particules sont émises et transportées au sein d’un domaine qui couvre une partie de l’hémisphère nord. La résolution du modèle est de $0,75^\circ$ selon les deux directions de l’horizontale. Le modèle couvre les longitudes de $64,625^\circ\text{O}$ à $69,625^\circ\text{E}$ et les latitudes de $30,375^\circ\text{N}$ à $74,625^\circ\text{N}$. Au sein de FLEXPART, les concentrations en ozone dans la stratosphère sont calculées en fonction de la vorticité potentielle (PV) à la tropopause. [Beekmann, Ancellet, and Mégie, 1994] ont montré que la vorticité potentielle était un bon

marqueur de l’origine stratosphérique de l’ozone observé dans la troposphère. Des particules initialement présentes dans la troposphère ($PV < 2$ pvu) ne sont pas utilisées. Au contraire, les particules de la stratosphère ($PV > 2$ pvu) possède une masse d’ozone calculée par la formule (7.1).

$$M_{O_3} = M_{air} P C 48/29 \quad (7.1)$$

où M_{air} est la masse d’air que représente la particule, P est la vorticité potentielle (PV) en pvu, $C = 60 \times 10^{-9}$ pvu⁻¹ est la relation ozone/PV (Stohl et al., [2000]) et le facteur 48/29 convertit le rapport de mélange volumique en rapport de mélange massique.

7.3.2. Approche eulérienne avec le modèle MOZART

Comparée à la formulation lagrangienne, la formulation eulérienne est moins adaptée pour décrire le transport et la dispersion d’un ensemble de particules à cause de la diffusion numérique due à la discrétisation des équations sur un maillage. Dans leur cas d’étude, Roelofs et al. [2003] montrèrent pourtant que les modèles eulériens donnaient de meilleurs résultats que les modèles lagrangiens pour décrire les STE. Les modèles eulériens sont largement utilisés pour étudier le transport, la dispersion et la chimie dans la basse troposphère et dans la CLA. Les modèles eulériens traitant de la dynamique sont facilement utilisables en entrée de modèles de chimie transport comme ceux utilisés dans la chaîne PREVALP. La version 2 de MOZART utilise une formulation eulérienne pour calculer le transport et la dispersion des polluants dans la troposphère et la stratosphère. MOZART utilise les champs dynamiques globaux disponibles en prévision ou en analyse du service météorologique américain NCEP. MOZART inclut un mécanisme chimique basé sur 50 espèces et 118 réactions en phase gazeuse et 18 réactions hétérogènes. Afin de prendre en compte l’ozone stratosphérique dans le modèle, la paramétrisation SYNOZ [McLinden, Olsen, Hannegan, Wild, Prather, and Sundet, 2000] est utilisée. La résolution horizontale est de 2.5° (soit environ 150 km à la latitude 45°N).

7.3.3. Comparaison des approches lagrangienne et eulérienne

Structure générale dans la haute troposphère

Le 28 juillet 2004 à 0 h TU, un long filament d’air sec s’étire du sud de la Scandinavie à la mer Adriatique. Ce filament est visible sur l’image satellite de la figure 7-6. La zone de basses pressions sur la mer Adriatique et la Croatie est visible sur l’image satellite pour la vapeur d’eau (WV) sous la forme d’un vortex d’air sec le 28 juillet. L’étude des colonnes d’ozone totales du satellite EP/TOMS fournit des informations supplémentaires sur l’intrusion. Des valeurs de 350 unités Dobson (DU) sont mesurées à l’emplacement du filament alors que la colonne totale d’ozone moyenne pour l’Europe était de 300 DU les 27 et 28 juillet. Au-dessus de la Croatie, des valeurs de 400 DU sont enregistrées par le satellite.

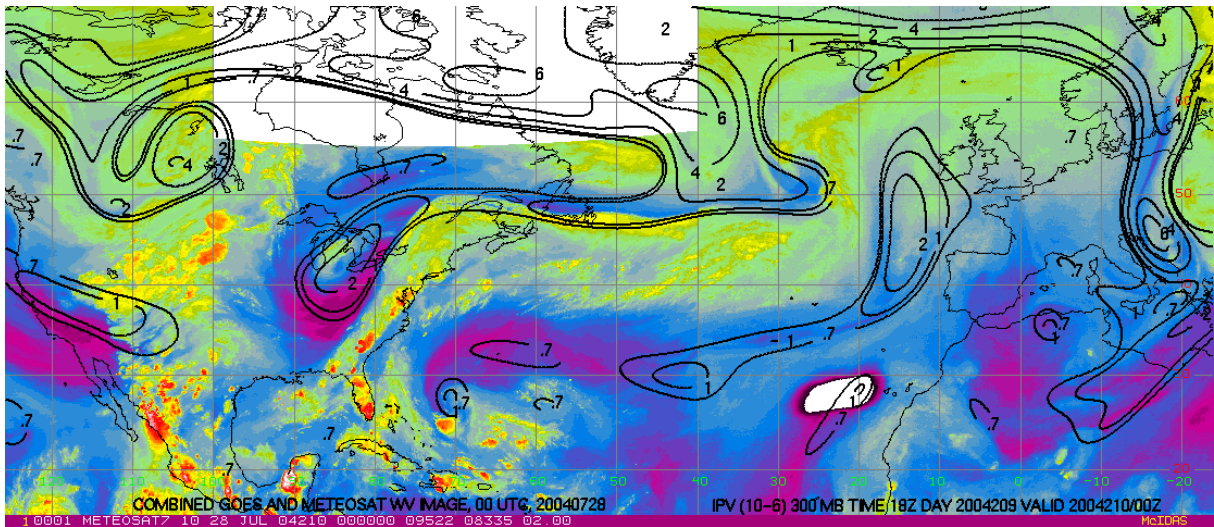


Figure 7-7. Images combinées GOES et METEOSAT WV le 28 juillet 2004 à 0 h TU avec les isocontours de PV dérivés des prévisions GFS

L'intrusion alpine dans la basse troposphère

La poche d'air stratosphérique détectée par les mesures aux sites alpins est bien vue par les traceurs d'ozone stratosphérique de MOZART et FLEXPART. MOZART estime à 7 ppbV la part d'ozone stratosphérique dans cette intrusion alors que FLEXPART l'estime à 80 ppbV. Le traceur d'ozone de SYNOZ sous-estime largement les teneurs en ozone au sein de l'intrusion en comparaison avec les mesures. Seule la partie ouest des Alpes est touchée par cette poche ce qui explique l'absence de détection à la station du Zugspitze. Les figures 7-8 à 7-10 présente les résultats du traceur ozone de FLEXPART. Le 27 juillet à 4 h TU, le filament d'ozone stratosphérique est visible jusqu'à 4000 m asl (figure 7-8). La poche d'ozone est formée à ce moment à partir du filament visible jusqu'à 4000 m au-dessus de l'Allemagne. Ce filament est observé à Frankfurt par le vol MOZAIC (figure 7-6). Le 27 juillet à 10 h TU, la poche d'ozone avec en son sein des concentrations de 120 ppbV est bien formée lorsqu'elle se sépare du filament à l'altitude de 4000 m asl. Au même moment, le filament au-dessus de l'Allemagne est encore bien visible à 4000 m, ce qui est en bon accord avec la concentration de 140 ppbV mesurée par le vol MOZAIC de 9h12 TU. Le 27 juillet à 22 h TU, la poche d'air atteint une altitude de 2500 m dans la région de Chamonix (longitude 5°20'E). Elle est alors complètement dissociée du filament principal visible à la longitude 14°E sur l'image satellite de la figure 7-7. A ce moment la poche commence à être mélangée dans la troposphère et la concentration en traceur en ozone chute à 80 ppbV. Les résultats de FLEXPART suggèrent que les fortes concentrations d'ozone mesurées à l'OHP étaient plutôt dues à une masse d'air polluée riche en ozone provenant de la région de Marseille. La comparaison des sorties du modèle avec les données sol est délicate à cause de la résolution trop grossière employée pour le calcul.

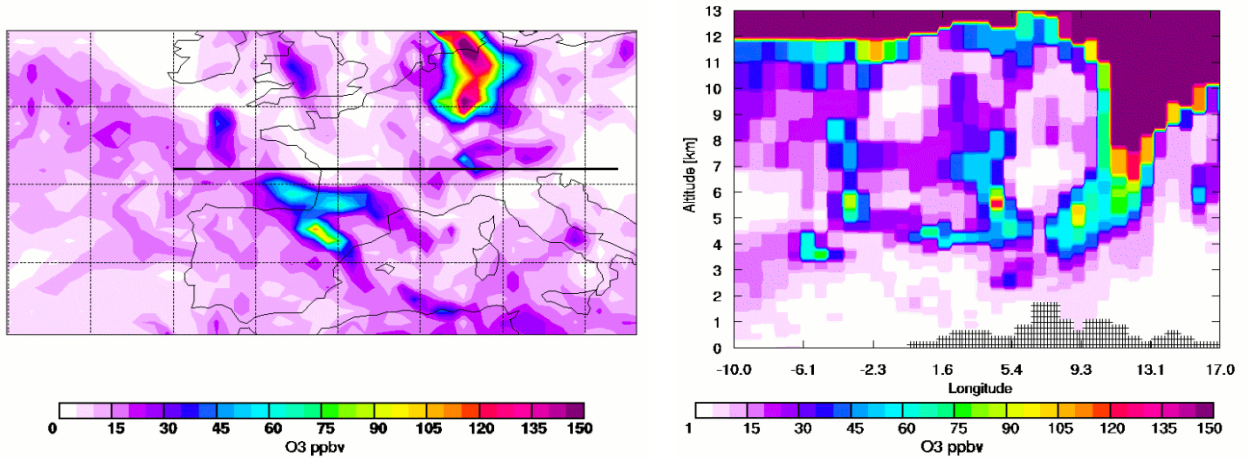


Figure 7-8. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 4:00 TU

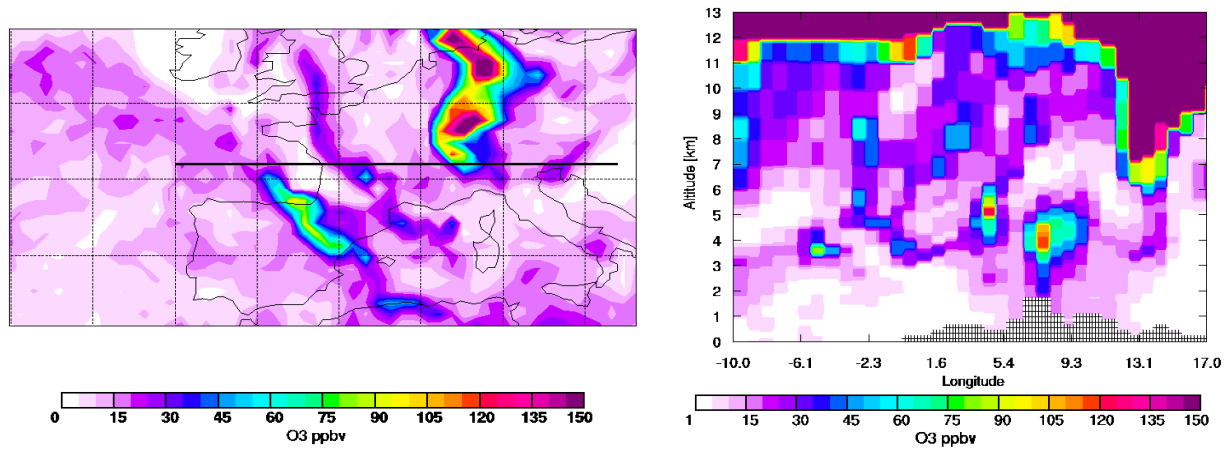


Figure 7-9. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 10:00 TU

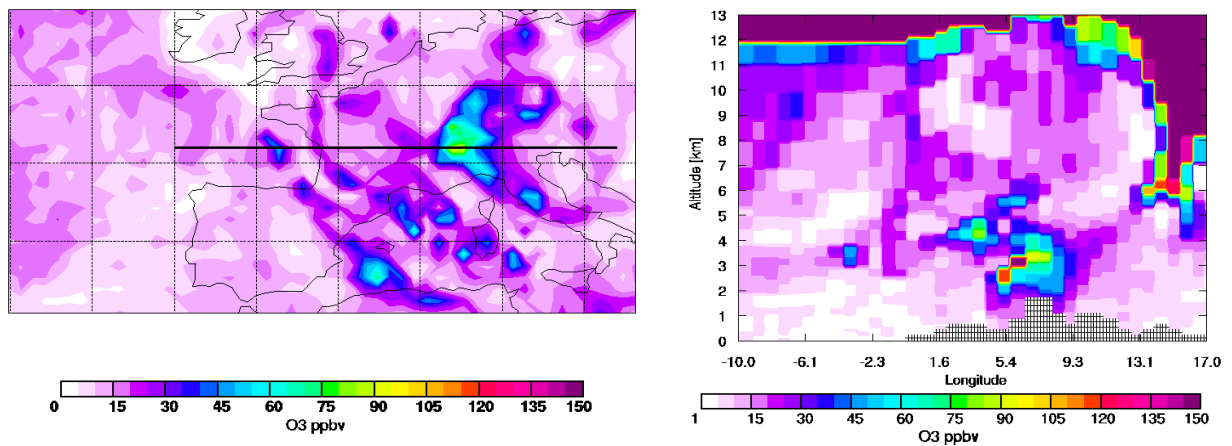


Figure 7-10. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 22:00 TU

A la résolution de FLEXPART (0,75°), la vallée de Chamonix n’est pas visible et il est impossible de faire une distinction entre les différents sites de mesure de la vallée. FLEXPART permet de fournir une approche qualitative du phénomène. Les altitudes auxquelles FLEXPART détecte l’intrusion stratosphérique semblent trop faibles par rapport aux mesures MOZAIK. La prise en compte grossière du massif alpin dans les champs ECMWF peut être une cause des écarts d’altitude entre FLEXPART et les mesures.

La comparaison des résultats de MOZART avec les mesures montre que le traceur issu de la paramétrisation SYNOZ est simulé en trop faible quantité dans la troposphère. MOZART détecte correctement le filament au-dessus de l’Allemagne le 27 juillet dans la matinée ainsi que la poche d’ozone qui a atteint les Alpes dans la soirée. La paramétrisation SYNOZ estime à 5 ppbV seulement la part d’ozone stratosphérique dans la poche d’air qui atteint les Alpes. Cela est 10 fois moins que la part d’ozone stratosphérique évaluée par les mesures. Le traceur ozone SYNOZ de MOZART ne sera pas utilisé pour forcer la modélisation à plus fine échelle. A la place du traceur SYNOZ, nous utiliserons pour le calcul le traceur ozone issu de FLEXPART. Les concentrations des autres espèces prises en compte dans le calcul MOZART (NO_x, SO_x, CH₄ et divers COVNM) restent réalistes et seront utilisées pour forcer le calcul chimique à l’échelle régionale.

Les mesures réalisées à Chamonix ont montré que l’intrusion stratosphérique n’avait pas d’impact sur le fond de vallée lors du pic d’ozone observé dans la nuit aux Grands-Montets. La nuit, en l’absence de thermiques, la TL est totalement découplée de la CLA. Qu’en est-il le jour suivant lorsque la CLC se développe sur le relief ? Les modèles grande échelle comme FLEXPART et MOZART donnent des réponses grossières à cette question puisque la paramétrisation turbulente utilisée dans la CLA ne représente pas la stratification de l’atmosphère des vallées de manière fine. L’utilisation d’un modèle régional de chimie transport alimenté à l’aide des sorties de FLEXPART va permettre de mieux comprendre le mélange de l’ozone d’origine stratosphérique et savoir s’il intervient dans la photochimie au sein de la CLA.

7.4. Impact sur l’ozone de la CLA en utilisant la chaîne PREVALP

Principe de la simulation

Afin de connaître l’impact de l’intrusion stratosphérique sur la photochimie de la région alpine, la modélisation eulérienne à mésoéchelle est utilisée. Le choix du modèle doit permettre de prendre en compte de façon satisfaisante l’ozone dans la basse troposphère. Le modèle CHIMERE a été conçu dans le but d’étudier les processus en liaison avec la CLA. Puisque notre domaine d’étude se trouve dans une région montagneuse avec de nombreux

sommets à plus de 4000 m, le toit de domaine de CHIMERE qui est de 500 hPa (ce qui équivaut à 5500 m pour l’atmosphère standard) se révèle être trop bas. Pour cette étude, le modèle Metphomod est utilisé car son toit de domaine peut être placé suffisamment haut pour bien prendre en compte toute la hauteur de la troposphère. Metphomod a été présenté dans la partie 2.3. Pour cette application, Metphomod est utilisé sur un large domaine couvrant l’ouest des Alpes avec une extension de 360 km par 360 km et une résolution horizontale de 6 km. Sur la verticale, le nombre de niveaux de Metphomod a été augmenté par rapport aux simulations présentées plus haut dans le manuscrit. Sur la verticale, Metphomod utilise 36 niveaux avec des hauteurs variables allant de 50 m pour les altitudes de 0 m à 500 m, puis 100 m pour les altitudes de 500 m à 2500 m, puis 500 m et 1000 m au-dessus de l’altitude 2500 m. Le toit du modèle est à 8000 m.

Tableau 7-2. Description des trois simulations avec les différentes conditions de bords pour la chimie utilisées par Metphomod

Simulation	Ozone dans la TL	Ozone stratosphérique	Autres espèces (NO _x , CH ₄ , ..)
MOZART1	Valeurs climatiques de MOZART pour juillet 2004	Pas d’ozone d’origine stratosphérique	Valeurs climatiques de MOZART pour juillet
MOZART2	Valeurs réalistes de MOZART pour 27-31 juillet 2004	Traceur d’ozone stratosphérique SYNOZ	Valeurs réalistes de MOZART pour 27-31 juillet 2004
FLEXPART	Valeurs réalistes de MOZART pour 27-31 juillet 2004	Traceur d’ozone stratosphérique FLEXPART	Valeurs réalistes de MOZART pour 27-31 juillet 2004

Aux frontières, Metphomod est alimenté par le calcul dynamique MM5 avec la résolution de 18 km réalisé sur le domaine France présenté à la partie 2.2.1. MM5 est alimenté avec les mêmes analyses ECMWF que FLEXPART, disponibles toutes les 6 heures. Les conditions de bords pour la chimie sont obtenues à partir du calcul CHIMERE sur le domaine couvrant la France présenté au chapitre 2. Afin de prendre en compte la composition de la TL de manière réaliste, CHIMERE utilise les sorties du modèle MOZART. Pour notre calcul, nous avons testé différents jeux de données décrits dans le tableau 7-2. Le module d’interpolation entre FLEXPART et Metphomod est présenté à la partie 2.4. Les résultats des simulations sont comparés avec les données à la station des Grands-Montets sur la figure 7-11.

Discussions sur les résultats

La figure 7-11 montre que la simulation avec le traceur FLEXPART estime correctement l’amplitude du pic d’ozone qui est d’environ 50 ppbV. Les deux pics de 18 h TU et 3 h TU ne sont pas simulés. Ces pics ne sont pas visibles sur les mesures de la Jungfraujoch de la figure 7-4. La durée de l’intrusion est plus longue dans la simulation que dans la réalité. Après

l’intrusion, les concentrations simulées aux Grands Montets sont surestimées de 10 à 15 ppbV. Cet offset est dû à la stagnation du traceur FLEXPART dans le modèle ou à un apport trop important de traceur FLEXPART aux bords du modèle.

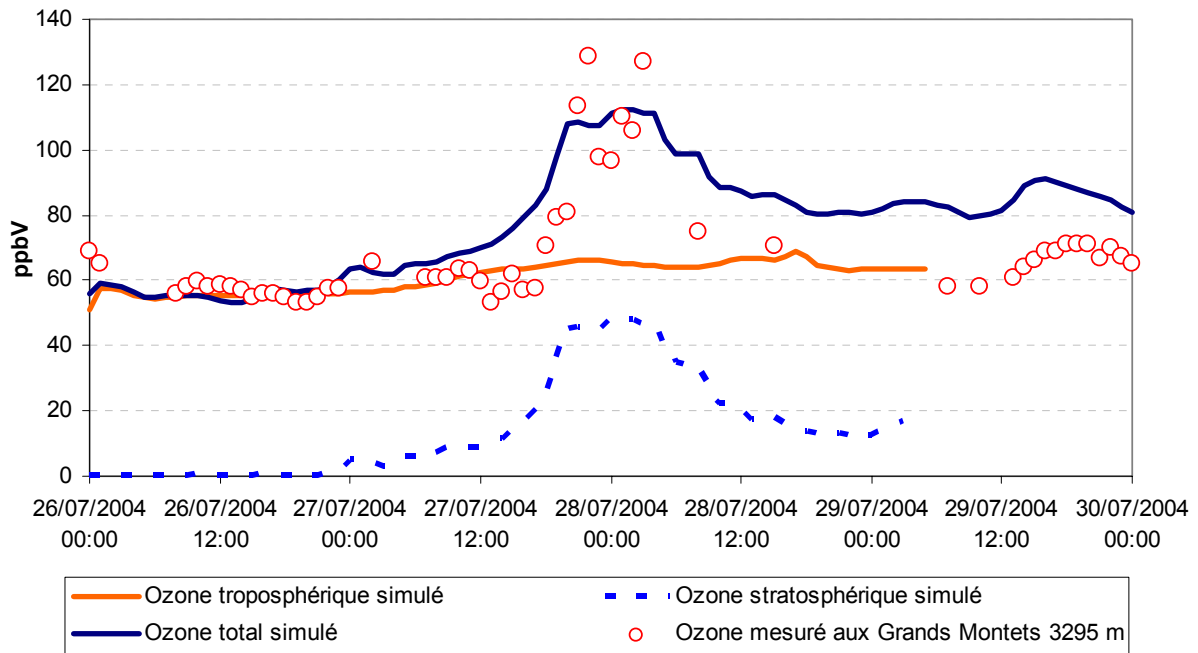


Figure 7-11. Rapport de mélange en ozone mesuré aux Grands-Montets (gros points), simulé par Metphomod avec les simulations MOZART1 (rouge), FLEXPART (bleu). Le traceur d’ozone stratosphérique est représenté en pointillés bleus.

Impact sur la photochimie dans la CLA

La stagnation du traceur FLEXPART dans le domaine Metphomod traduit un problème dans la construction des conditions de bord de Metphomod. Dans ces conditions, il est difficile d’utiliser les résultats de Metphomod pour les jours suivant l’intrusion. A cause du surplus d’ozone stratosphérique dans le domaine de Metphomod, l’impact sur la photochimie risquait d’être surestimé. Il a été montré que la paramétrisation de la CLA incluse dans FLEXPART mélangeait de manière trop importante l’ozone d’origine stratosphérique sur le relief. Cette paramétrisation utilise une topologie du massif alpin très grossière (la résolution est de 75 km) et conduit à de nombreuses erreurs. Ce mélange à grande échelle produit aux bords de Metphomod des concentrations d’ozone stratosphériques non réalistes. La réalisation de nouvelles simulations FLEXPART en désactivant cette paramétrisation devrait permettre d’améliorer la qualité du forçage aux frontières de Metphomod.

7.5. Discussion et conclusion

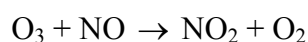
La forte intrusion d’ozone d’origine stratosphérique qui a touché les Alpes dans la nuit du 27 au 28 juillet 2004 a été bien documentée grâce à des données sol et des données en trois dimensions collectées dans le cadre de la campagne internationale ICARTT. Le couplage des deux modèles FLEXPART et MOZART traitant de la chimie et de la dispersion des espèces gazeuses dans la TL avec le modèle eulérien Metphomod a permis d’aboutir à une bonne description de cette intrusion au sein de vallée de Chamonix lors de la période d’intrusion. Le modèle FLEXPART a permis de bien caractériser l’évolution en temps et en espace du champ de concentration en ozone d’origine stratosphérique en comparaison à des données de sondages MOZAIC. Metphomod en utilisant des conditions aux limites réalistes pour la chimie issues du modèle MOZART et les valeurs du traceur d’ozone stratosphérique a permis de reproduire l’évolution temporelle de l’ozone lors de l’intrusion. Un problème d’accumulation du traceur issu de FLEXPART dans le domaine Metphomod n’a pas permis, pour l’instant, de continuer les investigations sur l’impact de l’intrusion stratosphérique sur la photochimie des jours suivants dans la partie occidentale des Alpes. Ce problème d’accumulation est certainement lié à la paramétrisation de CLA utilisé dans FLEXPART qui, utilisée en région montagneuse, induit de grosses erreurs dans la distribution verticale des traceurs émis dans FLEXPART.

Cette étude s’est attachée à montrer l’occurrence d’une intrusion très rare à cette période de l’année. Afin de généraliser les résultats sur des périodes plus longues, une étude climatologique utilisant la chaîne de modèles est utile pour conclure sur l’impact de tels événements ponctuels sur le bilan de l’ozone. La détermination de bilans d’ozone précis dans la CLA en terrain complexe passe par l’utilisation de modèles de dynamique et de chimie prenant en compte de manière précise la topographie. Les mesures réalisées à Chamonix ont montré que les modèles grande échelle tels FLEXPART et MOZART n’étaient pas capables de diagnostiquer les niveaux d’ozone à une altitude précise. Ces modèles permettent néanmoins de fournir de bonnes conditions de bord à des modèles mésoéchelle comme MM5, CHIMERE ou Metphomod.

L’étude de cette intrusion stratosphérique a montré que l’air des montagnes n’était pas si pur qu’il le paraissait et que de tels événements devaient être pris en compte de manière plus systématique dans les futures études de qualité de l’air traitant de l’ozone dans les vallées alpines.

Conclusion générale

Ce travail de thèse a exploré à l'aide de différents cas d'étude certains processus ayant un impact sur la photochimie et la distribution verticale de différentes espèces gazeuses et particulaires dans l'atmosphère d'une région montagneuse comme celle de Grenoble. Avant toute chose, il est important de distinguer la période de l'année dans l'étude des processus gouvernant la qualité de l'air à l'échelle de la vallée. En hiver, la chimie de l'ozone dans l'air des vallées se comporte de manière assez linéaire. L'ozone disponible en altitude est mélangé à l'air de vallée sous l'effet du mélange turbulent créé par la convection ou le cisaillement. La présence d'émissions de NO importantes dans le fond des vallées va conduire à la destruction de l'ozone par la réaction



En été, avec des températures dépassant 30°C et un mélange plus important des précurseurs de l'ozone sous l'effet des thermiques et des vents de pentes, l'ozone est produit en grande quantité en périphérie des agglomérations et au sein des vallées alpines. La chimie de l'ozone devient fortement non linéaire. Dans ces conditions, on distingue l'ozone importé depuis la troposphère libre et depuis des couches réservoir de l'ozone produit *in situ* dans la CLC. Il a été montré qu'une part importante de l'ozone observé dans les vallées a une origine « régionale ». La part produite localement équivaut en moyenne à 25 à 40 % de la concentration maximum observée dans les panaches. Dans les zones avec de fortes émissions de NO_x, comme les centres urbains, l'ozone est titré par le NO même lors du maximum de mélange convectif l'après-midi. Le terme « régional » reste assez flou car dans notre étude, la quantité régionale dépend de la taille de nos domaines de calcul. Plus notre domaine de calcul local sera étendu et plus cette part régionale sera faible. Une meilleure approche est de distinguer l'ozone provenant de la troposphère libre, l'ozone stocké dans la couche réservoir et l'ozone produit dans la CLC. La mise en évidence de la stratification verticale de l'atmosphère en région montagneuse et l'existence de couches réservoir rendent plus complexe la quantification des échanges entre les vallées, la troposphère libre et les plaines adjacentes.

La mise en évidence de deux régimes de CLC dans la région grenobloise, un régime libre et un régime piégé, a montré que la production d'ozone locale pouvait être amplifiée dans certaines conditions. Sous couvert d'une circulation régionale particulière, le vent de vallée qui se développe dans la vallée de Grenoble va rentrer en contact avec le vent soufflant à une altitude de 750 hPa et créer un front. Au niveau de ce front la convergence des masses d'air piégées latéralement par le relief va créer des ascendances importantes. Grâce à ce processus, l'ozone produit dans le vent de vallée est injecté dans la troposphère libre. La convergence des masses d'air va également avoir pour conséquence de ralentir le vent de vallée et la présence du cisaillement de vent entre la couche de vent de vallée et le régime de vent à 750

hPa va empêcher le développement de CLC au-dessus d'une certaine altitude. Ces deux effets vont aboutir à une part locale d'ozone plus forte dans le panache de l'agglomération et un stockage effectif de l'ozone produit localement dans des couches réservoir. Par régime de CLC libre, le mélange lors du développement de la CLC et la dilution de l'ozone produit par le vent de vallée avec des masses d'air propre vont limiter la part d'ozone due à des effets locaux au sein du panache de l'agglomération. Il a aussi été montré que l'humidité du sol joue un grand rôle dans les vallées sur le développement de la CLC. Les hétérogénéités de sol importantes liées à l'humidité et à la végétation compliquent la description de la dynamique. D'autres processus comme l'effet d'ombrage ou la formation de cumulus de convection sur les pentes jouent certainement un grand rôle sur le développement et la disparition de la CLC mais ils restent à être quantifiés à l'aide de modèles avec des paramétrisations adaptées. L'étude de la POI 2 d'ESCOMPTE a mis en évidence des phénomènes de mélange et de transport très semblables à ceux rencontrés dans les vallées. La convergence de la brise de mer et du vent régional crée une circulation similaire à la circulation de CLC piégée décrite dans les chapitres 3 et 4 pour Grenoble. Pour nos journées d'étude, le mélange vertical induit par ces phénomènes de convergence s'est révélé 5 fois plus faible dans les simulations sur la zone ESCOMPTE que dans les simulations sur la région grenobloise.

En hiver, il a été montré qu'une grande part de la pollution par les NO_x, le benzène et les particules est d'origine locale aux vallées. L'accumulation de ces polluants jour après jour correspond à la présence d'une couche stable à une altitude inférieure aux crêtes de la vallée. Pour Grenoble, cette altitude semble typiquement de 900 m asl. Malgré le développement d'une CLC durant la journée, si la hauteur de la CLC ne dépasse pas l'altitude de la couche stable, ce qui équivaldrait à détruire la couche stable, les polluants émis au sol sont mélangés dans la vallée mais ne sont pas expulsés en dehors de la vallée. L'îlot urbain de Grenoble semble jouer un rôle dans ce mécanisme puisque la hauteur de la CLC au-dessus des sols urbains est supérieure à la hauteur de la CLC au-dessus des zones rurales. Des études supplémentaires sont nécessaires pour connaître l'impact de la géométrie de la vallée sur la hauteur de mélange type. La modélisation de la chimie des particules reste un challenge à relever dans les années à venir. Sans des études expérimentales caractérisant la composition et la distribution en taille de l'aérosol, associées à une modélisation de la dynamique des vallées, la tâche sera difficile. Cependant, vu le peu d'échanges entre la CLA des vallées, la troposphère libre et la CLA des plaines adjacentes, l'étude de l'aérosol en hiver dans les vallées présentera des caractéristiques très locales. A l'inverse, en été, la chimie de l'aérosol régional dominera les concentrations observées de manière similaire à l'ozone.

Vers une amélioration des outils de simulation dédiés au terrain montagneux

La comparaison des résultats obtenus dans le cadre de cette thèse avec d'autres modèles en cours de développement est vivement souhaitée pour confirmer les résultats obtenus. On pense à des modèles comme Méso-NH-C. L'utilisation du modèle CHIMERE à une résolution horizontale de l'ordre du kilomètre en terrain montagneux reste également possible à condition de modifier le calcul des coefficients de mélange verticaux et d'élever le toit du modèle au-dessus de 500 hPa pour prendre en compte le mélange sur les reliefs. Enfin, un couplage des modèles régionaux de la chaîne avec des modèles de circulation générale (GCM) ou des modèles de type FLEXPART permettrait de quantifier de manière plus précise les échanges entre la CLA et la troposphère libre en région montagneuse. Le chapitre 7 a montré, par l'étude d'un cas d'intrusion stratosphérique, que l'impact de l'ozone provenant de la stratosphère était plus important sur les reliefs qu'en plaine. Une étude systématique des échanges entre la CLA et la troposphère libre permettrait d'établir des bilans d'ozone beaucoup plus précis que ceux réalisés à l'aide de modèles de type GCM. En effet, à cause d'une résolution trop grossière et l'utilisation de schémas de CLA non locaux, ces modèles ne décrivent pas correctement la stratification de l'atmosphère en région alpine.

Vers une description précise des vallées

Ce travail de thèse a utilisé des données provenant de plusieurs sources : données issues d'observations météorologiques opérationnelles, périodes d'observations intensives, données d'organismes divers (CEA, ASCOPARG, ...). Bien que les résultats obtenus permettent de tirer des enseignements sur le mélange dans les terrains montagneux étudiés, de nombreuses incertitudes subsistent. On citera en premier lieu les incertitudes liées aux paramètres du sol et de la végétation. Le chapitre 6 a montré que l'humidité du sol jouait un rôle important dans le développement du vent de vallée et avait un impact sur la hauteur de mélange. La végétation semble avoir moins d'impact sur la dynamique de l'atmosphère. La diversité des sols et des couverts végétaux est beaucoup plus importante en terrain montagneux qu'en plaine. Une description précise de la dynamique et de la chimie nécessiterait de disposer de données adéquates du type : distribution spatiale des essences dans les forêts, type du sol (roche nue, couvert végétal), hauteur de rugosité. La présence de l'agglomération de Grenoble pose des questions qui n'ont pas été traitées dans ce travail. On a montré que l'îlot urbain de Grenoble accentuait le mélange vertical des particules durant l'hiver (partie 4.2) et qu'il interagissait avec le vent de vallée. Ces résultats de simulations restent à être confirmés par des études expérimentales.

Et plus tard ?

Les changements rapides intervenant dans l'agglomération grenobloise posent la question de la représentativité du travail effectué ici dans l'avenir. L'urbanisation croissante de la cuvette

(figure c-1), la disparition de certaines industries et l'évolution du parc automobile sont les principaux changements qui affectent la qualité de l'air au niveau local dans un avenir proche. Des études supplémentaires prenant en compte tous ces paramètres sont d'un intérêt manifeste pour mieux connaître l'atmosphère de la vallée. Un scénario d'augmentation de la température de 3°C lors d'un épisode comme celui de la canicule de 2003 a montré que l'ozone produit localement augmenterait de 25 %. Ce résultat pose des questions sur l'impact local du changement climatique observé à l'échelle planétaire.

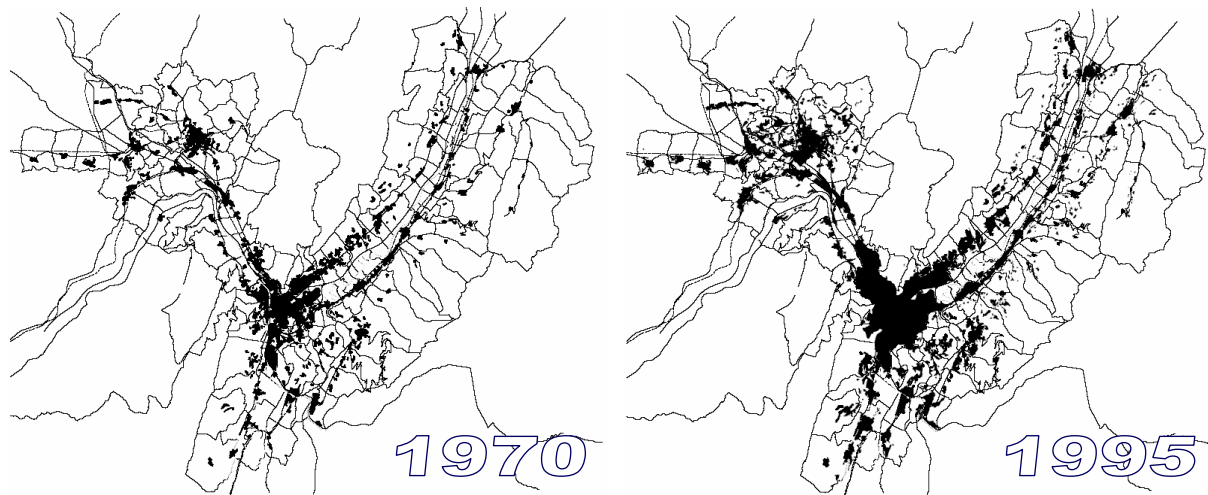


Figure c-1. Evolution de l'urbanisation de Grenoble de 1970 à 1995 (source AURG)

La chaîne de modèles développée dans ce travail de thèse a déjà été utilisée dans le cadre d'une application réglementaire décrite dans l'annexe C (PPA de Grenoble de 2005 à 2010). La chaîne de modèles a notamment permis de fournir des justifications scientifiques sur l'efficacité des réductions d'émissions réalisées en cas d'épisode de pollution par l'ozone à Grenoble. Elle est également utilisée à des fins de prévision des épisodes de pollution par l'ozone de manière quotidienne par les AASQA de la région depuis l'été 2005. Le passage d'un outil de recherche à un outil opérationnel n'était pas sans difficulté mais a été réalisé (pour l'instant) avec succès.

Liste des illustrations

Figure i-1. Evolutions des émissions de NO _x et de COVNM en France et évolution de la concentration en moyenne annuelle en ozone à Grenoble (données ASCOPARG)	14
Figure i-2. Pollution par les particules en hiver à Grenoble vue de la Bastille	15
Figure 1-1 Evolution de la température et de la teneur en ozone à la verticale de Payerne (Suisse) le 13 août 2003 (données Meteo Swiss)	20
Figure 1-2. Schématisation des échanges radiatifs entre l'espace, l'atmosphère et le sol de la Terre (schéma CNRS)	23
Figure 1-3. Les quatre types de mécanismes conduisant à des mouvements verticaux (schéma Service Météorologique du Canada)	24
Figure 1-4. Cycle diurne de la CLA d'après Stull [1988]	25
Figure 1-5. Etagement de la végétation dans un milieu montagnard d'après [Rougerie, 1990]	27
Figure 1-6. Schémas des systèmes de vent sur la topographie complexe des Alpes (a) durant la journée et (b) durant la nuit	28
Figure 1-7. Mesures de température potentielle virtuelle réalisées par les radiosondages à Payerne (Suisse) les 1 ^{er} et 13 août 2003 à 2:00 TU (données Meteo Swiss)	29
Figure 1-8. Mesures d'ozone par ballon captif réalisées le 8 juillet 2003 dans la matinée au-dessus d'un pré dans la plaine des Praz à l'altitude 1070 m (vallée de Chamonix). Les heures correspondent aux heures locales (TU+2) de décollage du ballon, chaque sondage durant environ 20 minutes.	30
Figure 1-9. Estimation de la hauteur de la CLA à l'aide des profils verticaux d'ozone mesurés aux Praz (triangles) et des profils verticaux de vent au Clos de l'Ours (cercles) le 8 juillet 2003 dans la matinée. La ligne continue est la hauteur de CLA diagnostiquée par MM5. Figure extraite de Chaxel et al. [2005].	31
Figure 1-10. Profils verticaux de NO ₂ , d'ozone et d'aérosol réalisés par l'avion Metair entre 7:28 et 7:54 TU le 26 juillet 1999 à la verticale du Versoud (vallée du Grésivaudan)	33
Figure 1-11. Profils verticaux de vent, θ_{virt} , d'humidité et de température réalisés par l'avion Metair entre 7:28 et 7:54 TU le 26 juillet 1999 à la verticale du Versoud (vallée du Grésivaudan)	33
Figure 1-12. Cycle du vent de vallée dans une vallée idéalisée d'après Defant [1951;1949].	34
Figure 1-13. Mécanisme de pompage à l'équateur favorisant les échanges entre la troposphère et la stratosphère (<i>tropopause folds</i>) d'après [Seinfeld and Pandis, 1998]	36
Figure 2-1. Localisation des deux domaines de calcul pour la région Rhône-Alpes (dx = 6 km) et la région de Grenoble (dx = 2 km)	42
Figure 2-2. Chaîne de modèles utilisés dans le cadre du travail de thèse	44

Figure 2-3. Profil typique de coefficient de mélange turbulent K . h est la hauteur de la CLA, z_{SL} est la hauteur de la couche de surface d'après [Stull, 1988]	47
Figure 2-4. Domaines MM5 utilisés pour le calcul météorologique	53
Figure 2-5. Direction du vent horizontal mesurée à Vif du 24 au 27 juillet 1999 (a), simulée à l'aide d'un domaine MM5 à maille de 1 km de côté (b) et simulée à l'aide d'un domaine MM5 à maille de 2 km de côté (c)	54
Figure 2-6. Centres des mailles du domaine FRA18KM avec l'emplacement approximatif du domaine RA6KM (carré blanc)	58
Figure 2-7. Centres des mailles du domaine RA6KM avec les limites administratives de la région Rhône-Alpes (lignes blanches)	58
Figure 2-8. Maillage cartésien utilisé par METPHOMOD d'après [Perego, 1999]	60
Figure 2-9. Impact de la réduction du pas de temps et de l'utilisation d'une couche d'amortissement au toit du modèle pour la vitesse du vent de la prévision du 4 octobre 2004.	66
Figure 2-10. Coefficients $a_{mois}(m,s)$, $a_{jour}(j,m,s)$ et $a_{heure}(h,j,m,s)$ pour le mois d'août 2003 ($m = 8$) appliqués aux émissions du trafic ($s = 7$) dans la région grenobloise	74
Figure 2-11. Réactivité de COV réels ou réactivité moyenne d'une classe de COV en considérant les 221 COV réels décrits par [Passant, 2002] avec les radicaux HO• dans les conditions standards (température 298 K et pression 1 atm)	75
Figure 2-12. Spéciation en différents COV réels de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]	76
Figure 2-13. Spéciation en composés aromatiques de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]	77
Figure 2-14. Spéciation en alcènes de la masse totale des émissions de COVNM de la classe SNAP niveau 1 pour les simulations CHIMERE et Metphomod [Passant, 2002]	77
Figure 2-15. Flux de PAR au sommet de la canopée calculé à partir de l'angle zénithal du soleil	81
Figure 2-16. Emissions biogéniques horaires moyennées sur toutes les mailles du domaine Metphomod (36 * 54 mailles de 4 km ² chacune) du 1 ^{er} au 8 août 2003	82
Figure 2-17. Emissions biogéniques moyennes sur le domaine Metphomod (36 * 54 mailles de 4 km ² chacune) du 1 ^{er} au 8 août 2003 en fonction de l'altitude du terrain	83
Figure 2-18. Cartes des moyennes des maximums journaliers d'ozone (en µg m ⁻³) du 1 ^{er} au 15 août 2003 simulées par CHIMERE (a) et Metphomod (b). Les isocontours représentent l'altitude du sol MM5 (a) et de Metphomod (b).	86
Figure 2-19. Section transverse à la vallée du Drac (sud de l'agglomération grenobloise) dans la direction O-E à la latitude 45°10'. Les concentrations en ozone (en ppbv) simulée par	

CHIMERE (a) et Metphomod (b) sont en échelle de gris. La température potentielle en contours (intervalles de 1 K) calculée par MM5 (a) et Metphomod (b).	86
Figure 3-1. Schéma de la circulation atmosphérique dans la cuvette grenobloise en régime anticyclonique	94
Figure 3-2. Topographie du Y grenoblois avec les principales routes, massifs montagneux et vallées	95
Figure 3-3. Direction de vent mesurée sur le mât du CEA pour une journée hivernale et une journée estivale	97
Figure 3-4. Ozone (a) et rapport de mélange en vapeur d'eau (b) mesurés entre 1000 m et 1800 m par l'avion MetAir le 26/07/1999 entre 12:30 et 15:30 TU interpolés par krigeage à partir des mesures (points). Ozone (c) et rapport de mélange en vapeur d'eau (d) moyens simulés par Metphomod à ces altitudes	99
Figure 3-5. Rose des vents au Versoud du 1 ^{er} au 15 août 2003 (données horaires de vent)	100
Figure 3-6. Coupe temps-hauteur de la direction du vent horizontal pour les 3 jours de la POI 1 mesuré par le profileur de vent DEGREANE (a) et calculée par le modèle (b) à Vif	104
Figure 3-7. Comparaison des résultats pour le O ₃ (en ppbV) avec les mesures LIDAR (a) et le forçage MM5/CHIMERE (b)	105
Figure 3-8. Parts en ppbV de l'ozone local (a) et d'origine régional (b) estimées par le modèle au-dessus de Vif	105
Figure 3-9. Rétrotrajectoires de vent arrivant à Grenoble le 27 juillet à 12 h TU aux altitudes 1000 m, 1500 m et 2500 m (données NOAA/ARL/HYSPLIT)	106
Figure 3-10. Schéma du régime de vent de vallée diurne par fort vent synoptique de S (cas du 27 juillet 1999) selon une coupe sud-nord	107
Figure 3-11. Schéma du régime de vent de vallée diurne par vent synoptique de nord-est (cas du 26 juillet 1999) selon une coupe sud-nord	108
Figure 3-12. Topologie du domaine ESCOMPTE (xmin = 622 km, ymin = 4737 km, dimensions 140 km * 140 km) en coordonnées UTM zone 31	110
Figure 3-13. Température de l'eau et température de l'air mesurées par la bouée Côte d'Azur (43,4°N 7,8°E) du 20 au 27 juin 2001	115
Figure 3-14. Concentrations d'ozone mesurées par le réseau fixe de stations sol le 21 juin 2001 (cartes krigées à partir des observations d'Airmaraix)	115
Figure 3-15. Températures mesurées (point) et simulées (lignes) dans l'atmosphère et à la surface du sol sur le site de Meyrargues mesurées du 21 au 27 juin 2001	116
Figure 3-16. Radiations globale et nette mesurées (points) et simulées (courbes) à Barben le 26 juin 2001	117
Figure 3-17. Flux de chaleur sensible, flux de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère mesurés (points) et simulés (lignes pleines) à Barben les 25 et 26 juin 2001	117
Figure 3-18. Flux de chaleur sensible, flux de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère mesurés (points) et simulés (lignes pleines) à Crau les 25 au 26 juin 2001	118

- Figure 3-19. Comparaison entre le profileur de vent DEGREANE pour la vitesse du vent (a) et la direction (b) et le modèle Metphomod pour la vitesse (c) et la direction (d) à Aix les Milles 120
- Figure 3-20. Comparaison de l’ozone en ppbV mesuré par le LIDAR DIAL d’Aix les Miles (gauche) avec l’ozone simulé par Metphomod (droite) le 25 juin 2001 de 5 h à 21 h TU 122
- Figure 3-21. Comparaison de l’ozone mesuré à Cadarache (vallée de la Durance) avec l’ozone simulé par le modèle Metphomod du 20 au 26 juin 2001 123
- Figure 3-22. Cartes de l’ozone simulé au sol le 25 juin 2001 à 15 h TU (a) et le 26 juin à 15 h TU (b) et mesuré aux mêmes dates aux stations fixes (points) 124
- Figure 3-23. Ozone en ppbV dans une coupe verticale orientée sud-nord passant par l’étang de Berre avec les vecteurs vents (v , w) et les contours de θ_{virt} le 24 juin à 16 h HL (a) et le 26 juin à 16 h HL (b) 126
- Figure 3-24. Energie cinétique turbulente (TKE) en Pa m^{-3} dans une coupe verticale sud-nord passant par Grenoble le 27 juillet 1999 à 15 h HL (a) et dans une coupe verticale sud-nord passant par l’étang de Berre le 24 juin 2001 à 15 h HL (b) 127
- Figure 4-1. Moyenne glissante hebdomadaire de la concentration en ozone mesurée au Casset durant les été 2000, 2001 et 2003 (ligne pleine) et tendance estivale (ligne pointillée) 134
- Figure 4-2. Sondages de Payerne pour l’humidité et l’ozone mesuré par sonde ECC (données WOUDC) 135
- Figure 4-3. Biais moyen sur les températures maximales à 2 mètres simulées par MM5 sur le domaine régionale (résolution horizontale de 6 km) 136
- Figure 4-4. Erreur moyenne de CHIMERE sur les maxima journaliers d’ozone à différentes stations de la région Rhône-Alpes 137
- Figure 4-5. Erreur moyenne de CHIMERE sur les maxima journaliers d’ozone à 45 sites de mesures de la région Rhône-Alpes en fonction des périodes de l’été 2003 138
- Figure 4-6. Validation pour la température, l’humidité et l’ozone à la station du Versoud (données ASCOPARG et Météo France) 140
- Figure 4-7. Vitesse du vent mesurée et simulée au Rondeau du 2 au 14 août 2003 (données ASCOPARG) 141
- Figure 4-8. Direction du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix du 8 au 14 août 2003 (données ASCOPARG) 141
- Figure 4-9. Carte d’analyse du 7 août 2003 à 6 h TU (Deutsche Wetter Dienst) 142
- Figure 4-10. Moyenne des pics d’ozone simulés du 1^{er} au 15 août 2003 sur le domaine de Grenoble (échelle de couleur) et mesurés (points) 143
- Figure 4-11. Ozone en ppbV (échelle de couleur) et vent (vecteurs) simulés à 17 h HL dans un plan vertical nord-sud passant par Grenoble (en UTM 31, $x = 615$ km) pour les 3, 4, 5 et 6 août 2003. Les vecteurs vents ont pour coordonnées (v , w). Les 3 et 6 août les isocontours de température potentielle virtuelle sont représentés. 145

Figure 4-12. Production locale de l'ozone pO_3 en ppbV simulée le 4, 6, 12 et 13 août 2003 à 15 h HL	147
Figure 4-13. Part locale de l'ozone simulé lors du maximum d'ozone au sud de l'agglomération grenobloise défini par une boîte en UTM 31 ($x = 700$ à 730 km ; $y = 4960$ à 4990 km ; $z = 1500$ à 2500 m)	149
Figure 4-14. Nombre de dépassements du seuil $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ simulés (couleurs) et mesurés (points)	150
Figure 4-15. Vue sur les vallées du Drac et de la Romanche depuis la station de l'Alpe du Grand Serre le 9 janvier 2006 lors d'une journée sans vent	152
Figure 4-16. Radiosondages réalisées à Lyon Saint-Exupéry du 2 au 15 février 2005 (données Université du Wyoming)	154
Figure 4-17. Direction du vent mesurée sur le pylône du CEA aux altitudes 10 et 30 m. Pour plus de lisibilité, la direction est corrigée de $+60^\circ$ à 30 m	155
Figure 4-18. Vitesse du vent horizontal mesurée à différentes hauteurs sur le mât du 1 au 13 février 2005	155
Figure 4-19. Gradient thermique vertical $\partial T/\partial z$ mesuré entre 5 stations météorologiques de la cuvette grenobloise du 1 ^{er} au 15 février 2005	155
Figure 4-20. Gradient thermique vertical $\partial T/\partial z$ mesuré grâce à trois caractérisations différentes sur le mât du CEA du 5 au 8 février 2005	156
Figure 4-21. Températures mesurées à différentes altitudes au mât du CEA et simulées au premier niveau du modèle Metphomod du 6 au 10 février 2005	162
Figure 4-22. Direction du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix les 7 et 8 février 2005	163
Figure 4-23. Vitesse du vent mesurée et simulée au Pont-de-Claix les 7 et 8 février 2005	163
Figure 4-24. Benzène mesuré à la station de Grenoble les Frênes (courbe grise et points) et simulé dans le premier niveau du modèle (courbe noire) du 2 au 15 février 2005 (a) et les 8, 9 et 10 février 2005 (b)	165
Figure 4-25. PM_{10} mesuré à la station de Grenoble les Frênes en moyenne horaire (points et courbe grise) et simulé dans le premier niveau du modèle à chaque heure (courbe noire) du 4 au 11 février 2005	166
Figure 4-26. PM_{10} en moyenne journalière mesuré à la station de Grenoble les Frênes (gris) et simulé dans le premier niveau du modèle (noir) du 2 au 15 février 2005	167
Figure 4-27. Rapport $\text{PM}_{2.5}/\text{PM}_{10}$ mesuré à la station de Grenoble les Frênes en moyenne horaire (points et courbe grise) et en moyenne glissante sur 24 heures (courbe noire)	168
Figure 4-28. Evolution de θ_{virt} au cours de la journée du 8 février à la verticale du centre de Grenoble	169
Figure 4-29. Evolution de la teneur en PM_{10} au cours de la journée du 8 février à la verticale du centre de Grenoble	170
Figure 4-30. 5 février 2005 : coupe S-N passant au centre du Y grenoblois (en UTM 31, $x = 615$ km) avec les concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} et les isocontours en K de	

- θ_{virt} . Les vecteurs vents (v , w) sont représentés avec un facteur 10 pour le vent vertical w 171
- Figure 4-31. 5 février 2005 : régime de sud ouest. Concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} simulées par le modèle dans un plan horizontal à 1300 m asl avec les vecteurs vent (u , v) 172
- Figure 4-32. 8 février 2005 : coupe S-N passant au centre du Y grenoblois (en UTM 31, $x = 615$ km) avec les concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} et les isocontours en K de θ_{virt} . Les vecteurs vents (v , w) sont représenté avec un facteur 10 pour le vent vertical w 173
- Figure 4-33. 8 février 2005 : régime de nord est. Concentrations en $\mu\text{g m}^{-3}$ du traceur PM_{10} simulées par le modèle dans un plan horizontal à 1300 m asl avec les vecteurs vent (u , v) 174
- Figure 4-34. Hauteur en mètres de la CLC diagnostiquée par Metphomod le 8 février 2005 à 10 h (a), 11 h (b), 15 h (c) et 16 h (d) HL dans la région grenobloise avec les vecteurs vents associés 175
- Figure 4-35. Mesures de radon réalisées sur le site du GENG et mesures de benzène réalisées sur le site des Frênes du 2 au 14 février 2005 177
- Figure 4-36. Mesures de la radioactivité des prélèvements 24 heures d'aérosol aux stations piscine Chorier et pylône réalisés sur filtre avec des échantillonneurs haut volume 178
- Figure 5-1. Domaines de calcul Metphomod utilisés pour valider le modèle sur la région Rhône-Alpes à l'aide des tubes à diffusion passive 181
- Figure 5-2. Boîte de protection, tubes à diffusion passive pour l'ozone et schéma d'un tube à diffusion passive [Chaxel, 2001] 182
- Figure 5-3. Boîte de protection, tubes à diffusion passive pour le NO_2 et le benzène [Pontet and Benmati, 2005] 184
- Figure 5-4. Emplacement des tubes à diffusion passive NO_2 et benzène (triangles) et des stations fixes mesurant le NO_2 (cercles) 185
- Figure 5-5. Concentrations moyennes en benzène en fonction des concentrations moyennes en NO_2 pour la quinzaine 1^{er} au 15 février 2006 mesurés par les tubes à diffusion passive dans la région Rhône-Alpes 186
- Figure 5-6. Comparaison des moyennes de NO_2 du 1^{er} au 15 février 2005 calculées par le modèle et intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul de la figure 5-1 sont distingués. 187
- Figure 5-7. Comparaison des moyennes de benzène du 1^{er} au 15 février 2005 calculées par le modèle et intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul de la figure 5-1 sont distingués. 188
- Figure 5-8. Cartographie des concentrations moyennes en $\mu\text{g m}^{-3}$ du 1^{er} au 15 février pour le benzène (haut) et le NO_2 (bas) calculées par Metphomod sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1 189

- Figure 5-9. Concentrations d'ozone en $\mu\text{g m}^{-3}$ mesurées au Casset et à Grenoble les Frênes durant l'été 2002. La période d'échantillonnage est contenue dans le rectangle rouge. 191
- Figure 5-10. Comparaison des moyennes d'ozone sur la semaine 18 au 25 juin 2002 calculées par le modèle avec les valeurs intégrées des tubes à diffusion passive. Les trois domaines de calcul sont indiqués par des symboles différents. 192
- Figure 5-11. Cartographie des concentrations moyennes en $\mu\text{g m}^{-3}$ en ozone du 18 au 25 juin 2002 calculées par Metphomod sur les trois domaines de calcul de la figure 5-1 193
- Figure 6-1. Hauteur en mètres de la CLC au-dessus du site de Grenoble les Frênes pour le cas de base (BC) et pour une augmentation de 1 % de la température (CLIMAT) 201
- Figure 6-2. Moyenne en $\mu\text{g m}^{-3}$ des pics d'ozone simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine de la figure 3-2 (échelle de couleur) et mesurés (points) pour le cas de base à gauche et le scénario T1 à droite 202
- Figure 6-3. Ozone en ppbV (couleurs) et température potentielle virtuelle en K (isocontours) simulés dans un plan vertical nord-sud passant par Grenoble (en UTM 31, x = 615 km) le 4 août 2003 à 16 h HL pour le cas de base en haut et pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3,7 K à 0 m asl) en bas 203
- Figure 6-4. Pourcentage d'augmentation de la moyenne des pics d'ozone moyens simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3 K au niveau de la mer) 204
- Figure 6-5. Répartition des émissions surfaciques de COVNM totaux dans le domaine de calcul de Metphomod pour la région grenobloise (36 * 54 mailles de 4 km² chacune) pour l'année 2003 [Quiniou and Chanut, 2005] 205
- Figure 6-6. Cycle diurne moyen de différents COV pour les 14 jours de canicule de 2003 calculé à l'aide des mesures au site de Champagnier sur la photo (en été, HL = TU + 2 h) 207
- Figure 6-7. Concentration en isoprène mesurée à 17 heures HL en fonction de la température à 2 mètres à 17 HL mesurée à la station de Champagnier durant l'été 2003. La courbe rouge correspond à une adaptation du modèle de Guenther et al. [1995] 208
- Figure 6-8. Cycle diurne simulé de différentes familles de COV simulé au site de Champagnier le lundi 4 août 2003 (heure TU) 209
- Figure 6-9. Variations de la température foliaire et du flux PAR (*Photosynthetically Active Radiation*) mesurées le 25 juin 2001 au-dessus d'une forêt de *quercus pubescens* extrait de [Simon, Dumergues, Bouchou, Solignac, and Torres, 2005] 210
- Figure 6-10. Emissions instantanées d'isoprène ISO (en mol km⁻² h⁻¹) le 3 août 2003 entre 16 h et 17 h de (gauche) et concentration en isoprène ISO (en ppbV) le 3 août 2003 à 17 h HL (droite) 211
- Figure 6-11. Pourcentage de réduction de la moyenne des pics d'ozone moyens simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA sans émissions de COVB 212

- Figure 6-12. Moyenne des pics d’ozone simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA (échelle de couleur) et mesurés (points) pour le cas de base (a) et le doublement des émissions biogéniques (b) 213
- Figure 6-13. Hauteur de la CLC au-dessus du site de Grenoble les Frênes pour le cas de base et pour une augmentation de la température de 1 % (soit 3,7 K à 0 m asl) 214
- Figure 6-14. Moyenne des pics d’ozone simulés du 1^{er} au 7 août 2003 sur le domaine PPA (échelle de couleur) et mesurés (points) pour le cas de base (a) et pour un sol et une canopée humides (b) 215
- Figure 7-1. Carte des Alpes avec les stations sol utilisées pour caractériser l’intrusion d’ozone 222
- Figure 7-2. Concentrations en ozone mesurées à différentes stations les 27 et 28 juillet 2004 224
- Figure 7-3. Images satellite METEOSAT dans le canal visible pour les 27 et 28 juillet 2004 à 12 TU 225
- Figure 7-4. Séries temporelles pour l’ozone (ppbV), l’humidité relative (%) et les particules en suspension PTS ($\mu\text{g m}^{-3}$) à la Jungfraujoch le 27 et 28 juillet 2004 226
- Figure 7-5. Mesures par LIDAR et par sonde O₃ ECC à la verticale de l’OHP (ppbV) le 27 juillet 2004 à 10 h TU (données IPSL/SA) 227
- Figure 7-6. Sondage MOZAIC pour O₃, HR et CO au-dessus de Frankfort le 27 juillet 2004 at 9:12 TU (données LA) 227
- Figure 7-7. Images combinées GOES et METEOSAT WV le 28 juillet 2004 à 0 h TU avec les isocontours de PV dérivés des prévisions GFS 230
- Figure 7-8. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 4:00 TU 231
- Figure 7-9. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 10:00 TU 231
- Figure 7-10. Sorties FLEXPART pour le traceur d’ozone stratosphérique à 3500 m asl avec la section verticale en noir (gauche) et dans la section indiquée le 27 juillet à 22:00 TU 231
- Figure 7-11. Rapport de mélange en ozone mesuré aux Grands-Montets (gros points), simulé par Metphomod avec les simulations MOZART1 (rouge), FLEXPART (bleu). Le traceur d’ozone stratosphérique est représenté en pointillés bleus. 234

Liste des tables

Tableau 2-1. Données de sol utilisées dans MM5 (données NCAR).....	52
Tableau 2-2. Résolution et taille des domaines MM5 utilisés les données ECMWF	53
Tableau 2-3. Liste des espèces du mécanisme MELCHIOR 2 d'après [Derognat, 1998].....	57
Tableau 2-4. Coefficients a_k et b_k utilisés pour définir les niveaux verticaux de CHIMERE..	59
Tableau 2-5. Domaines Metphomod utilisés pour l'analyse et la prévision	65
Tableau 2-6. Liste des espèces chimiques du mécanisme MELCHIOR 2 équivalentes aux espèces RACM.....	69
Tableau 2-7. Concentrations par défaut des espèces RACM tirées de [Couach, 2002]	70
Tableau 2-8. Caractéristiques de différents cadastres utilisés pour la modélisation.....	72
Tableau 2-9. Indices de réactivité de différents COV obtenus avec un modèle de boîte utilisant le mécanisme SAPRC-99 d'après [Hakami, Harley, Milford, Odman, and Russell, 2004] et [Carter, 1994]	79
Tableau 2-10. Caractéristiques des solveurs météo utilisés dans la chaîne PREVALP.....	84
Tableau 2-11. Caractéristiques des solveurs chimiques utilisés dans la chaîne PREVALP	85
Tableau 2-12. Temps de calcul pour les différents modèles de la chaîne sur une machine à deux processeurs AMD [®] Athlon 1,8 GHz	88
Tableau 3-1. Caractéristiques des régimes des vallées et cluses du Y grenoblois pour une journée d'août.....	95
Tableau 3-2. Caractéristiques des sites pris en compte dans l'étude du module de sol d'après Michou et al. [2005]	112
Tableau 3-3. Disponibilité des données en fonction de la période d'étude (POI 2 du 20 au 26 juin 2001 et POI 3 du 2 au 4 juillet 2001).....	113
Tableau 3-4. Paramètres de sol pour les 25 classes de sol de Metphomod (24 classes USGS + 1 classe urbain diffus).	114
Tableau 4-1. Données à 500 hPa des sondages de Payerne mesurant l'ozone par sonde ECC (données WOUDC).....	135
Tableau 4-2. Rapports des émissions de PM ₁₀ sur les émissions de NO ₂ selon la classe SNAP d'ordre 1 en France (données EMEP 2002 sauf pour la classe SNAP 2)	158
Tableau 4-3. Emissions du parc automobile moyen français (source CCFA, 2004)	161
Tableau 5-1. Caractéristiques techniques des tubes à diffusion utilisés pour l'ozone	183
Tableau 5-2. Dates des campagnes de mesure de l'ozone par tubes à diffusion lors de l'année 2005.....	185
Tableau 5-3. Dates des campagnes de mesure de l'ozone par tube à diffusion lors de l'été 2002.....	190
Tableau 6-1. Scénarios de sensibilité et principales modification par rapport au cas de base (BC).....	200

Tableau 7-1. Localisation des stations sol utilisées pour caractériser l'intrusion stratosphérique	222
Tableau 7-2. Description des trois simulations avec les différentes conditions de bords pour la chimie utilisées par Metphomod	233
Tableau B-1. Différents ellipsoïdes disponibles dans le module de conversion géographique PROJECTION	272

Liste des références

1. Allen, G., C. Soutias, P. Koutrakis, R. Reiss, F. W. Lumann, and P. T. Roberts, Evaluation of the TEOM method for measurement of ambient particulate mass in urban areas, *Journal of Air and Waste Management Association*, 47, 682-689, 1997.
2. Apsley, D. D. and I. P. Castro, A limited-length-scale k - model for the neutral and stably-stratified atmospheric boundary layer, *Boundary Layer Meteorology*, 83, 75-98, 1997.
3. Arritt, R., R. A. Pielke, and M. Segal, Variations of sulfur dioxide deposition velocity resulting from terrain-forced mesoscale circulations, *Atmospheric Environment*, 22, 715-723, 1988.
4. Atkinson, R., Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds under atmospheric conditions, *Chemical Review*, 86, 69-201, 1986.
5. Aymoz, G., Etude de la fraction carbonée de l'aérosol atmosphérique à Chamonix et St Jean de Maurienne : évolutions saisonnières, sources et caractéristiques chimiques, 2005.
6. Bastin, S., P. Drobinski, A. Dabas, P. Delville, O. Reitebuch, and C. Werner, Impact of the Rhône and Durance valleys on sea-breeze circulation in the Marseille area, *Atmospheric Research*, 74, 303-328, 2004.
7. Beekmann, M., G. Ancellet, and G. Mégie, Climatology of tropospheric ozone in southern Europe and its relation to potential vorticity, *Journal of Geophysical Research*, 99, 12841-12854, 1994.
8. Bouchou, P., Quantification et élément de paramétrisation du dépôt sec de l'ozone à l'interface sol/végétation atmosphère au-dessus de trois écosystèmes méditerranéens (programme ESCOMPTE), Université Paul Sabatier, Toulouse, 2004.
9. Bouscaren, R., Rivière, E., and Heymann, Y. Réalisation d'un inventaire d'émissions simplifiées pour la ville de Grenoble (1 heure - 1 km²). CITEPA. Convention n° 98338001. 1999.
10. Brulfert, G., Modélisation des circulations atmosphériques pour l'étude de la pollution des vallées alpines, Université Joseph Fourier, Grenoble, France, 2005.
11. Brulfert, G., C. Chemel, E. Chaxel, and J.-P. Chollet, Modelling photochemistry in alpine valleys, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 2341-2355, 2005.

12. Brulfert, G., J.-P. Chollet, B. Jouve, and H. Villard, Atmospheric emission inventory of the Maurienne valley for an atmospheric numerical model, *Science of the Total Environment*, 2005.
13. Businger, J., J. Wyngaard, Y. Izumi, and E. Bradley, Flux profile relationship in the atmospheric surface layer, *Journal of Atmospheric Sciences*, 28, 181-189, 1971.
14. Carter, W. P. L., Development of ozone reactivity scales for volatile organic compounds, *Journal of Air and Waste Management Association*, 44, 881-899, 1994.
15. Chaxel, E. Mise en place d'une méthodologie pour la cartographie de l'ozone à l'échelle du département de l'Isère. ASCOPARG. 2001. Grenoble, France.
16. Chaxel, E., Sensibilité aux émissions des concentrations en polluants dans la vallée de Chamonix, Master thesis, LEGI, 2003.
17. Chaxel, E., J.-P. Chollet, G. Brulfert, and C. Chemel, Production of ozone in the Chamonix Valley (France), *International Journal of Environment and Pollution*, 24, 201-217, 2005.
18. Chemel, C., Transport et mélange en terrain complexe, application à la dynamique atmosphérique dans les vallées encaissées, 2006.
19. Chemel, C. and J.-P. Chollet, Observations of the Daytime Boundary Layer in Deep Alpine Valleys, *Boundary Layer Meteorology*, 119, 239-262, 2006.
20. Clappier, A., A correction method for use multidimensional time splitting advection algorithms: application to two and three dimensional transport, *Monthly Weather Review*, 126, 232-242, 1998.
21. Colella, P. and P. R. Woodward, The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations, *Journal of Computational Physics*, 174, 1984.
22. Coll, I., S. Pinceloup, P. E. Perros, G. Laverdet, and G. Le Bras, 3D analysis of high ozone production rates observed during the ESCOMPTE campaign, *Atmospheric Research*, 74, 477-505, 2004.
23. Couach, O., Etude et modélisation de la pollution photochimique sur la ville de Grenoble, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2002.
24. Couach, O., I. Balin, R. Jiménez, S. Perego, F. Kirchner, P. Ristori, V. Simeonov, P. Quaglia, V. Vestri, A. Clappier, B. Calpini, and H. van den Bergh, Etude d'un épisode photochimique à l'aide d'un modèle méso-échelle et de mesures intensives sur la région de Grenoble, *Pollution Atmosphérique*, 174, 277-295, 2002.
25. Couach, O., I. Balin, R. Jiménez, P. Ristori, S. Perego, F. Kirchner, V. Simeonov, B. Calpini, and H. van den Bergh, An investigation of ozone and planetary boundary layer dynamics over the complex topography of Grenoble combining

- measurements and modeling, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 3, 549-562, 2003.
26. Couach, O., F. Kirchner, R. Jiménez, I. Balin, S. Perego, and H. van den Bergh, A development of ozone abatement strategies for the Grenoble area using modeling and indicators, *Atmospheric Environment*, 1425-1436, 2004.
 27. Coupé, S., Escalades dans le massif de la Chartreuse, Edisud, 1986.
 28. Cros, B., P. Durand, H. Cachier, P. Drobinski, E. Fréjafon, C. Kottmeier, P. E. Perros, V.-H. Peuch, J.-L. Ponche, Robin D., and al., The ESCOMPTE program: an overview, *Atmospheric Research*, 69, 241-279, 2004.
 29. Dallmayr, R., Analyse des données d'un radar UHF profileur de vent dans le cadre du projet POVA (Pollution des Vallées Alpines), LEGI, Université Joseph Fourier, Grenoble, France, 2003.
 30. De Wekker, S. F. J., D. G. Steyn, J. D. Fast, M. W. Rotach, and S. Zhong, The performance of RAMS in representing the convective boundary layer structure in a very steep valley, *Environmental Fluid Mechanics*, 5, 35-62, 2005.
 31. Defant, F., Zur theorie des Hangwinde, nebst Bemerkungen zur Theorie des Berg- und Talwinde, *Arch.Meteor.Geophys.Bioklim.*, A1, 421-450, 1949.
 32. Defant, F., Local winds, edited by T.M.Malone, p. 672, American Meteorological Society, 1951.
 33. Derognat, C. Elaboration d'un code chimique simplifié applicable à l'étude de la pollution photooxydante en milieu urbain et rural. 1998. Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.
 34. Derognat, C., M. Beekmann, M. Baueumle, D. Martin, and H. Schmidt, Effect of biogenic volatile organic compound emissions on tropospheric chemistry during the Atmospheric Pollution Over the Paris Area (ESQUIF) campaign in the Ile-de-France region, *Journal of Geophysical Research*, 108, 8560- doi:10.1029/2001JD001421, 2003.
 35. Duhaut, D. and C. Vigier, Escalades autour de Grenoble, 2001.
 36. Fischer, P. H., B. Brunekreef, and E. Lebreton, Air pollution related deaths during the 2003 heat wave in the Netherlands, *Atmospheric Environment*, 38, 1083-1085, 2004.
 37. Fotiadi, A. K., Echanges biosphère-atmosphère des oxydes d'azote et de l'isoprène en région Méditerranéenne (programme ESCOMPTE), Université Paul Sabatier, 2003.
 38. François, S., E. Grondin, S. Fayet, and J.-L. Ponche, The establishment of the atmospheric emission inventories of the ESCOMPTE program, *Atmospheric Research*, 74, 5-35, 2005.

39. Furger, M., J. Dommen, W. K. Graber, L. Poggio, A. S. H. Prevot, S. Emeis, G. Grell, T. Trickl, B. Gomiscek, B. Neininger, and G. Wotawa, The VOTALP Mesolcina Valley Campaign 1996 - concept, background and some highlights, *Atmospheric Environment*, 34, 1395-1412, 2000.
40. Grell, G., S. Emeis, W. R. Stockwell, T. Schoenemeyer, R. Forkel, J. Michalakes, R. Knoche, and W. Seidl, Application of a multiscale, coupled MM5/chemistry model to the complex terrain of the VOTALP valley campaign, *Atmospheric Environment*, 34, 1435-1453, 2000.
41. Grell, G. A., Dudhia, J., and Stauffer, D. R. A description of the fifth-generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5). NCAR/TN-398. 1995. NCAR/Mesoscale and Microscale Meteorology division.
42. Guenther, A., C. N. Hewitt, D. Erickson, R. Fall, C. Geron, T. Graedel, P. Harley, L. Klinger, L. Klinger, M. Lerdau, W. A. McKay, T. Pierce, B. Scholes, R. Steinbrecher, R. Tallamraju, J. Taylor, and P. Zimmerman, A global model of natural volatile organic compound emissions, *Journal of Geophysical Research*, 100, 8873-8892, 1995.
43. Guilbaud, C., Etude des inversions thermiques : Application aux écoulements atmosphériques dans les vallées encaissées, Université Joseph Fourier, Grenoble, France, 1996.
44. Hakami, A., R. A. Harley, J. B. Milford, M. T. Odman, and A. G. Russell, Regional, three-dimensional assessment of the ozone formation potential of organic compounds, *Atmospheric Environment*, 38, 121-134, 2004.
45. Hansen, M., De Fries, R., Townshend, J. R. G, and Sohlberg, R. 1 Km Land Cover Classification Derived from AVHRR: The Global Land Cover Facility. Version: 1.0. College Park. 1998. Maryland.
46. Henne, S., M. Furger, S. Nyeki, M. Steinbacher, B. Neininger, S. F. J. De Wekker, J. Dommen, N. Spichtinger, A. Stohl, and A. S. H. Prévôt, Quantification of topographic venting of boundary layer air to the free troposphere, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4, 497-509, 2004.
47. Holton, J. R., P. H. Haynes, M. E. McIntyre, A. R. Douglas, R. B. Rood, and L. Pfister, Stratosphere-troposphere exchange, *Review of Geophysics*, 33, 403-439, 1995.
48. Hong, S. Y. and H. L. Pan, Nonlocal boundary layer vertical diffusion in a medium-range forecast model, *Monthly Weather Review*, 124, 2322-2339, 1996.
49. Horowitz, L. W., S. Walters, D. L. Mauzerall, L. K. Emmons, P. J. Rasch, C. Granier, X. Tie, J.-F. Lamarque, M. G. Schultz, G. S. Tyndall, J. J. Orlando, and G. P. Brasseur, A global simulation of tropospheric ozone and related tracers: Description and evaluation of MOZART, version 2, *Journal of Geophysical Research*, 108, 4784-doi:10.1029/2002JD002853, 2003.
50. Jaffrezo, J. L. Rapport final POVA. 2005.

51. Kerbiriou, M.-A., Dynamique d'une inversion thermique, transport et mélange en vallée encaissée : une étude numérique tridimensionnelle, Université Joseph Fourier, Grenoble, France, 2004.
52. Lamaud, E., A. Carrarra, Y. Brunet, A. Lopez, and A. Druilhet, Ozone fluxes above and within a pine forest canopy in dry and wet conditions, *Atmospheric Environment*, 74, 89-116, 2005.
53. Langmann, B., S. E. Bauer, and I. Bey, The influence of the global photochemical composition of the troposphere on European summer smog, Part I: Application of a global to mesoscale model chain, *Journal of Geophysical Research*, 108, 4146, 2003.
54. Lasry, F., I. Coll, and E. Buisson, An insight into the formation of severe ozone episodes: modeling the 21/03/01 event in the ESCOMPTE region, *Atmospheric Research*, 74, 191-215, 2004.
55. Lasry, F., I. Coll, and E. Buisson, An insight into the formation of severe ozone episodes: modeling the 21/03/01 event in the ESCOMPTE region, *Atmospheric Research*, 74, 191-215, 2005.
56. Machado Da Silva, L., Transport d'un traceur passif dans l'atmosphère : expériences et simulations numériques - Relief complexe, le site de Grenoble -, 1998.
57. McLinden, C. A., S. C. Olsen, B. Hannegan, O. Wild, M. J. Prather, and J. Sundet, Stratospheric ozone in 3-D models: A simple chemistry and the cross-tropopause flux, *Journal of Geophysical Research*, 105, 14653-14666, 2000.
58. Menut, L., I. Coll, and F. Lasry, Impact of meteorological data resolution on the forecasted ozone concentrations during the ESCOMPTE IOP2a and IOP2b, *Atmospheric Research*, 74, 139-159, 2005.
59. Menut, L., Schmechtig, C., Marticorena, B., Chatenet, B., Chiapello, I., and Moulin, C. Development of a Regional Dust Transport Model: Preliminary Sensitivity Studies. AGU Fall Meeting. 2004. San Francisco.
60. Michou, M., P. Laville, D. Serça, A. Fotiadi, P. Bouchou, and V.-H. Peuch, Measured and modeled dry deposition velocities over the ESCOMPTE area, *Atmospheric Research*, 74, 89-116, 2005.
61. Middleton, P., W. R. Stockwell, and Carter W., Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for atmospheric modeling, *Atmospheric Environment*, 24A, 1107-1133, 1990.
62. Monin, A. and A. Obukhov, Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground, *Tr.Akad.Nauk.*, 24, 1963-1987, 1954.
63. Monn, C. and M. Hangartner, Passive sampling for ozone, *Journal of Air and Waste Management Association*, 40, 1990.

64. Monteiro, A., R. Vautard, C. Borrego, and A. I. Miranda, Long-term simulations of photo oxidant pollution over Portugal using the CHIMERE model, *Atmospheric Environment*, 39, 3089-3101, 2005.
65. Neininger, B. and J. Dommen, POLLUMET Luftverschmutzung und Meteorologie in der Schweiz, Bern, Switzerland, 1996.
66. Passant, N. R. Speciation of UK emissions of NMVOC. AEAT/ENV/R/0545. 2002.
67. Perego, S., Ein numerisches Modell zur Simulation des Sommersmogs, 1996.
68. Perego, S., Metphomod - a numerical mesoscale model for simulation of regional photosmog in complex terrain : model description and application during Pollumet 1993 (Switzerland), *Meteorology and Atmospheric Physics*, 70, 43-69, 1999.
69. Perrino, C., A. Pietrogangelo, and A. Febo, An atmospheric stability index based on radon progeny measurements for the evaluation of primary urban pollution, *Atmospheric Environment*, 35, 5235-5244, 2001.
70. Pontet, S. and Benmati, M. Etude de qualité de l'air : Cartographie régionale du benzène et du NO₂. 2005. Grenoble, GIERSA.
71. Prather, M. and D. Ehhalt, Atmospheric Chemistry and Greenhouse Gases, in *Climate Change 2001: The Scientific Basis*, edited by J.T.Houghton et al., pp. 239-287, Cambridge University Press, 2001.
72. Puygrenier, V., F. Lohou, B. Campistron, F. Saïd, G. Pigeon, B. Bénech, and D. Serça, Investigation on the fine structure of sea-breeze during ESCOMPTE experiment, *Atmospheric Research*, 74, 329-353, 2004.
73. Quiniou, C. and Chanut, H. Réalisation d'un cadastre pour la région Rhône-Alpes (1 km²). GIERSA. 2005. Grenoble, France.
74. Rampanelli, G., D. Zardi, and R. Rotunno, Mechanisms of up-valley winds, *Journal of the Atmospheric Sciences*, 61, 3097-3111, 2004.
75. Roelofs, G. J., A. S. Kentarchos, T. Trickl, A. Stohl, W. J. Collins, R. A. Crowther, D. Hauglustaine, A. Klonecki, K. S. Law, M. G. Lawrence, and R. von Kuhlmann, Intercomparison of tropospheric ozone models: Ozone transport in a complex tropopause folding event, *Journal of Geophysical Research*, 108, 8529-doi:10.1029/2003JD003462, 2003.
76. Rougerie, G., Les montagnes dans la biosphère, 1990.
77. San José, R., A. Stohl, K. Karatzas, T. Bohler, P. James, and J. L. Pérez, A modelling study of an extraordinary night time ozone episode over Madrid domain, *Environmental Modelling & Software*, 20, 587-593, 2005.
78. Schmidt, H., C. Derognat, R. Vautard, and M. Beekmann, A comparison of simulated and observed ozone mixing ratios for the summer of 1998 in Western Europe, *Atmospheric Environment*, 35, 6277-6297, 2001.

79. Schneider, N., W. Eugster, and B. Schlichler, The impact of historical land-use changes on the near-surface atmospheric conditions on the Swiss plateau, *Earth Interactions*, 8, 1-27, 2004.
80. Schuepbach, E., D. L. Davis, and A. C. Massacand, An unusual springtime ozone episode at high elevation in the Swiss Alps: contributions both from cross-tropopause exchange and from the boundary layer, *Atmospheric Environment*, 33, 1735-1744, 1999.
81. Seibert, P., F. Beyrich, S.-E. Gryning, S. Joffre, A. Rasmussen, and P. Tercier, Review and intercomparison of operational methods for the determination of the mixing height, *Atmospheric Environment*, 34, 1001-1027, 2000.
82. Seinfeld, J. H. and S. N. Pandis, Atmospheric chemistry and physics: From air pollution to climate change, Wiley-Interscience, 1998.
83. Shapiro, R., Smoothing, filtering and boundary effects, *Review of Geophysical Space Physics*, 70, 43-70, 1970.
84. Shashahani, V., Belledonne : toponeige Isère, Arc, Romanche, Volopress, Grenoble, France, 2001.
85. Simon, V., L. Dumergues, P. Bouchou, G. Solognac, and L. Torres, Isoprene emission rates and fluxes measured above a Mediterranean oak (*Quercus pubescens*) forest, *Atmospheric Research*, 74, 37-48, 2005.
86. Simpson, D. and al., Inventorying emissions from nature in Europe, *Journal of Geophysical Research*, 104, 8113-8152, 1999.
87. Simpson, D., A. Guenther, C. N. Hewitt, and R. Steinbrecher, Biogenic emissions in Europe. 1. Estimates and uncertainties, *Journal of Geophysical Research*, 100, 22875-22890, 1995.
88. Smirnova, T. G., J. M. Brown, and S. G. Benjamin, Performance of different soil model configurations in simulating ground temperature and surface fluxes, *Monthly Weather Review*, 125, 1870-1884, 1997.
89. Smolarkiewicz, P. K. and G. A. Grell, A class of monotone interpolation schemes, *Journal of Computational Physics*, 101, 431-440, 1992.
90. Stauffer, D. R. and N. L. Seaman, Multiscale four-dimensional data assimilation, *Journal of Applied Meteorology*, 33, 416-434, 1994.
91. Stedman, J. R., The predicted number of air pollution related deaths in the UK during the August 2003 heatwave, *Atmospheric Environment*, 38, 1087-1090, 2004.
92. Steinbacher, M., S. Henne, J. Dommen, P. Wiesen, and A. S. H. Prévôt, Nocturnal trans-alpine transport of ozone and its effects on air quality on the Swiss Plateau, *Atmospheric Environment*, 38, 4538-4550, 2004.

93. Stockwell, W. R., F. Kirchner, M. Kuhn, and S. Seefeld, A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, *Journal of Geophysical Research*, 102, 25847-25879, 1997.
94. Stockwell, W. R., P. Middleton, J. S. Chang, and X. Tang, The second generation regional acid deposition model chemical mechanism for regional air quality modeling, *Journal of Geophysical Research*, 95, 16343-16367, 1990.
95. Stohl, A., S. Eckhardt, C. Forster, P. James, and N. Spichtinger, On the pathways and timescales of intercontinental air pollution transport, *Journal of Geophysical Research*, 107, 4684-doi:10.1029/2001JD001396, 2002.
96. Stohl, A., C. Forster, A. Frank, P. Seibert, and G. Wotawa, Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5, 2461-2474, 2005.
97. Stohl, A., M. Hittenberger, and G. Wotawa, Validation of the Lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large scale tracer experiments, *Atmospheric Environment*, 32, 4245-4264, 1998.
98. Stohl, A., N. Spichtinger, P. Bonasoni, H. Feldmann, M. Memmesheimer, H. E. Scheel, T. Trickl, S. Hübener, W. Ringer, and M. Mandl, The influence of stratospheric intrusions on alpine ozone concentrations, *Atmospheric Environment*, 34, 1323-1354, 2000.
99. Stohl, A. and D. J. Thomson, A density correction for Lagrangian particle dispersion models, *Boundary Layer Meteorology*, 90, 155-167, 1999.
100. Stull, R., An introduction to Boundary Layer Meteorology, pp. 1-666, Kluwer Academic Publishers, 1988.
101. Tavernier, M., Etude numérique des ondes internes en vallée encaissée : mécanisme de génération et mélange induit, Master 2 Mécanique des Fluides et Transferts thesis, LEGI, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2006.
102. Triplet, J.-P. and G. Roche, L'équilibre vertical dans l'atmosphère, in *Météorologie générale*, edited by Météo France, pp. 85-114, Franc, 1986.
103. Troen, I. and L. Mahrt, A simple model of the atmospheric boundary layer: Sensitivity to surface evaporation, *Boundary Layer Meteorology*, 37, 129-148, 1986.
104. Troussier, F. and Locoge, N. Caractérisation du comportement spatio-temporel des composés organiques volatils en atmosphère urbaine et périurbaine. Ecole des Mines de Douai. 2004.
105. Tulet, P., K. Suhre, C. Mari, F. Solmon, and R. Rosset, *Atmospheric Environment*, 36, 4491-4501, 2002.
106. Vautard, R., M. Beekmann, J. Roux, and D. Gombert, Validation of a deterministic forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area, *Atmospheric Environment*, 35, 2449-2461, 2001.

107. Vautard, R., C. Honoré, M. Beekmann, and L. Rouil, Simulation of ozone during the August 2003 heat wave and emission control scenarios, *Atmospheric Environment*, 39, 2957-2967, 2005.
108. Vautard, R., D. Martin, M. Beekmann, R. Friedrich, A. Jaubertie, D. Kley, M. Lattuati, P. Moral, B. Neininger, and J. Theloke, Paris emission inventory diagnostics from Air Pollution Over the Paris Region (ESQUIF) airborne measurements and a chemistry transport model, *Journal of Geophysical Research*, 108, doi:10.1029/2002JD002797, 2003.
109. Vestreng, V., Breivik, K., Adams, M., Wagener, A., Goodwin, J., Rozovskkaya, O., and Pacyma, J. M. Inventory Review 2005, Emission Data reported to LRTAP Convention and NEC Directive, Initial review of HMs and POPs, Technical report MSC-W 1/2005, ISSN 0804-2446. 2005.
110. Wackernagel, H., C. Lajaunie, N. Blond, C. Roth, and R. Vautard, Geostatistical risk mapping with chemical transport model output and ozone station data, *Ecological Modelling*, 179, 177-185, 2004.
111. Wesely, M. L., Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models, *Atmospheric Environment*, 23, 1293-1304, 1989.
112. Wesely, M. L. and B. B. Hicks, Some factors that affect the deposition rate of sulfur dioxide and similar gases on vegetation, *Journal of Air Pollution*, 27, 1110-1116, 1977.
113. Whiteman, D. C., Observations of thermally developed wind systems in mountainous terrain, in *Atmospheric processes over complex terrain*, edited by American Meteorological Society, pp. 5-42, Boston, MA, USA, 1990.
114. Wotawa, G. and H. Kromp-Kolb, The research project VOTALP - general objectives and main results, *Atmospheric Environment*, 34, 1319-1322, 2000.
115. Zängl, G., An improved method for computing horizontal diffusion in a sigma-coordinate model and its application to simulations over mountainous topography, *Monthly Weather Review*, 130, 1423-1432, 2002.
116. Zhang, L., J. R. Brook, and R. Vet, On ozone dry deposition - with emphasis on non-stomatal uptake and wet canopies, *Atmospheric Environment*, 36, 4787-4799, 2002.
117. Zou, X., Y.-H. Kuo, and Y.-R. Guo, Assimilation of atmospheric radio refractivity using a nonhydrostatic adjoint model, *Monthly Weather Review*, 123, 2229-2249, 1995.

ANNEXES

Annexe A.1. Liste des acronymes

APPA	Association pour la Prévention de la Pollution de l'Air
ARPS	Advanced Regional Prediction System
ASCOPARG	Association de Surveillance et de Contrôle de la Pollution de l'Air de la Région grenobloise
CCFA	Comité des Constructeurs Français d'Automobiles
CEA	Commissariat à l'Energie Atomique
CHIMERE	CHimere Is a Model for Exciting Research in Environment
CLA	Couche limite atmosphérique
CLC	Couche limite convective
CLM	Couche limite marine
CNRS	Centre National de la Recherche Scientifique
COVB	Composés organiques volatils biogéniques (COVB = terpènes, isoprènes, ...)
COVNM	Composés organiques volatils non méthaniques
ESCOMPTE	Etude sur Site pour Contraindre les Modèles de Pollution atmosphérique et de Transport d'Emissions
ESQUIF	Etude et Simulation de la QUALité de l'air en Ile de France
GCM	Global Circulation Model
GCTM	Global Chemistry Transport Model
GFS	Global Forecasting System, l'ensemble de prévision opérationnel du NCEP
GIERSA	Groupement d'Intérêt Economique pour la Surveillance de l'Air
GRIB	GRIdded Binary (format de fichier binaire développé par la WMO)
ICARTT	International Consortium for Atmospheric Research on Transport and Transformation
IR	Infra Rouge
LAI	Leaf Area Index
MARS	Meteorological Archive Retrieval System (service ECMWF)
Metphomod	Meteorological and Photochemical Model
MIR	Maximum Incremental Reactivity [<i>Carter</i> , 1994]
MM5	Fifth-generation Pennsylvania State University/NCAR Mesoscale Model
MOIR	Maximum Ozone Incremental Reactivity [<i>Carter</i> , 1994]
MOZAIC	Measurement of Ozone and Water Vapor by Airbus In-Service Aircraft
MPI	Message-Passing Interface
NCEP	National Center for Environmental Prediction, service météorologique des E.U.
NO _x	Oxydes d'azote (NO _x = NO + NO ₂)
PAR	Photosynthesis Active Radiation
PM ₁₀	Particules en suspension de diameter aérodynamique inférieur à 10 microns
POI	Période d'observation Intensive

POVA	programme POLLution des Vallées Alpines
PTS	Particules Totales en Suspension
PV	Vorticité potentielle
PVM	Parallel Virtual Machine
RACM	Regional Atmospheric Chemistry Model
SIG	Système d'Informations Géographiques (en anglais GIS)
STE	Echanges Stratosphère-Troposphère
TAPOM	Transport and Air Pollution Model
TKE	Turbulent Kinetic Energy (énergie cinétique turbulente)
TL	Troposphère libre
USGS	United States Geologic Survey
WMO	World Meteorological Organization
WOUDC	World Ozone and Ultraviolet Radiation Data Centre

Annexe A.2. Liste des symboles et constantes physiques et chimiques

c_p	Chaleur spécifique massique de l'air sec à pression constante ($c_p = 1004 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
e_0	Pression de vapeur saturante pour l'eau standard ($e_0 = 611 \text{ Pa}$)
e_{sat}	Pression de vapeur saturante pour l'eau
K_z	Coefficient de diffusivité turbulente selon la verticale
L_v	Chaleur latente de vaporisation de l'eau $L_v = 2,46 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$
m_{air}	Masse molaire de l'air ($m_{air} = 28,97 \text{ g.mol}^{-1}$)
m_{eau}	Masse molaire de l'eau ($m_{eau} = 18,02 \text{ g.mol}^{-1}$)
N	Fréquence de Brunt-Väisälä
N_a	Nombre d'Avogadro ($N_a = 6,0221 \cdot 10^{23} \text{ molecules mol}^{-1}$)
P	Pression atmosphérique exprimée en Pascal ($1 \text{ Pa} = 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$)
P_0	Pression de référence ($P_0 = 1,02315 \cdot 10^5 \text{ Pa}$)
q, q_v	Rapport de mélange en vapeur d'eau (en kg par kg d'air)
R	Constante des gaz et vaut $8,314 \text{ J.mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
R_{air}	Constante des gaz pour l'air sec ($R_{air} = 287,04 \text{ J.kg}^{-1} \text{ .K}^{-1}$)
R_{vapeur}	Constante des gaz pour la vapeur d'eau ($R_{vapeur} = 461,4 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
S_0	Constante solaire ($S_0 = 1370 \text{ W m}^{-2}$)
T	Température absolue exprimée en K
T_0	Température standard $T_0 = 273,15 \text{ K}$
T_v	Température virtuelle
Γ_{humide}	Gradient adiabatique d'une atmosphère humide ($\Gamma_{humide} \approx 6 \text{ K km}^{-1}$)
Γ_{sec}	Gradient adiabatique d'une atmosphère sèche ($\Gamma_{sec} \approx 9,8 \text{ K km}^{-1}$)
ϕ_{lat}	Flux de chaleur latente entre le sol et l'atmosphère
ϕ_s	Flux de chaleur sensible entre le sol et l'atmosphère
θ_v	Température potentielle virtuelle
θ_{sec}	Température potentielle pour l'air sec
θ_{humide}	Température potentielle pour l'air humide
ρ	Densité de l'air exprimée en kg m^{-3} ($\rho = 1,01 \text{ kg m}^{-3}$ au niveau de la mer)

Annexe A.3. Description des classes de la nomenclature SNAP niveau 1

- S1 Combustion dans le secteur énergétique et industries de transformation (sources fixes)
- S2 Centrales de combustion non-industrielles (sources fixes)
- S3 Combustion dans l'industrie manufacturière (sources fixes)
- S4 Procédés de production (sources fixes)
- S5 Extraction et distribution de combustibles fossiles et d'énergie géothermique
- S6 Utilisation de solvants et d'autres produits
- S7 Traffic routier
- S8 Autres sources mobiles et machines
- S9 Traitement des déchets
- S10 Agriculture
- S11 Autres sources et puits

Annexe A.4. Indicateurs de performance utilisés pour les scores de la chaîne PREVALP

Les indicateurs statistiques utilisés pour mesurer les performances de MM5, CHIMERE et Metphomod dans ce travail de thèse sont définis ci-dessous.

Predicted Mean $P_{mean} = \sum_{i=1}^N P_i$, where P_i are the predictions.

Observed Mean $O_{mean} = \sum_{i=1}^N O_i$, where O_i are the observations.

Predicted Standard Deviation $P_{std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (P_i - P_{mean})^2}$

Observed Standard Deviation $O_{std} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (O_i - O_{mean})^2}$

Mean Normalised Bias $MNB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{P_i - O_i}{O_i}$

Mean Bias $MB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_i - O_i$

Mean Absolute Normalised Gross Error $MANGE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|P_i - O_i|}{O_i}$

Mean Error $MNB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |P_i - O_i|$

Pearson Correlation Coefficient $r = \frac{N \left(\sum_{i=1}^N O_i P_i \right) - \left(\sum_{i=1}^N O_i \right) \left(\sum_{i=1}^N P_i \right)}{\sqrt{\left[N \left(\sum_{i=1}^N O_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N O_i \right)^2 \right] \left[N \left(\sum_{i=1}^N P_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^N P_i \right)^2 \right]}}$

Root Mean Square Error $RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}$

Systematic Root Mean Square Error $RMSE_S = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{P}_i - O_i)^2}$

Unsystematic Root Mean Square Error $RMSE_U = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{P}_i - P_i)^2}$

$$\text{Index of Agreement } IOA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|P_i - O_{mean}| + |O_i - O_{mean}|)^2}$$

$$\text{Measures of Skill } SKILL_E = \frac{RMSE_U}{O_{std}}, SKILL_V = \frac{P_{std}}{O_{std}} \text{ et } SKILL_E = \frac{RMSE}{O_{std}}$$

Note that N is the number of observations and $\hat{P}_i = a + bO_i$ is the linear regression fitted formula with intercept (a) and slope (b).

The Robust Highest Concentration $RHC = C(R) + (\bar{C} - C(R)) \ln\left(\frac{3R-1}{2}\right)$ pollution statistic

is from Cox and Tikvart (1990), with $C(R)$ the R^{th} highest concentration and \bar{C} the mean of the top $R-1$ concentrations. The value of $R = 11$ is used here so that \bar{C} is the average of the top-ten concentrations, which is an accepted statistic for evaluation of model performance (Hanna, 1989). The RHC is preferred to the actual peak value because it mitigates the undesirable influence of unusual events, while still representing the magnitude

Annexe B.1. Conversions entre systèmes géographiques (PROJECTION)

La chaîne PREVALP utilise des modèles et des données provenant de différents organismes. A l'échelle planétaire, les différents organismes ne travaillent pas avec les mêmes coordonnées géographiques et l'utilisation des données dans un cadre commun nécessite de réaliser le passage entre les différentes projections géographiques. La chaîne PREVALP utilise des données utilisant trois grands systèmes de coordonnées :

1. Les coordonnées géographiques en longitude et latitude définie sur une géoïde (ED 50, WGS 84 ou NTF)
2. La projection Lambert Conique Conforme et pour la France le Lambert 2 Etendu
3. La projection Universal Transverse Mercator

La conversion des coordonnées entre les différentes projections nécessite l'utilisation de Systèmes d'Information Géographiques (SIG). Ces outils sont coûteux et assez lourds à l'emploi puisqu'il faut transformer manuellement les coordonnées. Afin de réaliser automatiquement des conversions entre les différentes projections, le module PROJECTION a été développé. PROJECTION est un ensemble de routines codées en FORTRAN créées à partir de routines existantes et disponibles librement. La conversion des coordonnées entre la projection lat-long et le Lambert Conique Conforme (et Lambert 2 Etendu) est réalisée à l'aide des routines du GCTP - USGS General Cartographic Transformation Package disponible librement à <ftp://edcftp.cr.usgs.gov/pub/software/gctpc>. La conversion des coordonnées entre la projection lat-long et l'UTM est réalisée à l'aide de routines développées à partir des algorithmes disponibles sur le site de l'IGN (www.ign.fr).

Systèmes de projection géographiques disponibles

Afin d'utiliser une projection des coordonnées d'un point, la surface de la Terre nécessite d'être assimilée à une ellipsoïde. Les trois paramètres définissant une ellipsoïde sont son demi grand axe a et son demi petit axe b . On définit l'aplatissement f par $f = (a - b)/a$. Les différents ellipsoïdes utilisés dans le module PROJECTION sont récapitulés dans le tableau B.1.

*Validation du module **PROJECTION***

Le module PROJECTION a été validé à l'aide de différents jeux de données disponibles sur le site de l'IGN pour l'UTM et de l'USGS pour le Lambert Conique Conforme. Les figure B-1

et B-2 fournissent un exemple de conversion des coordonnées pour l'Amérique du Nord réalisée à l'aide du module de projection PROJECTION.

Tableau B-1. Différents ellipsoïdes disponibles dans le module de conversion géographique PROJECTION

Ellipsoïde	a (mètres)	f
ED 50	6378388	297
WGS 84	6378137	298,257223563
NTF	6378249,2	293,466021

Annexe B.2. Paramètres de sol de Metphomod

Tableau B.2-1. Paramètres de sol pour les 25 classes de sol de Metphomod (24 classes USGS + 1 classe urbain diffus) utilisés pour la simulation de la période de canicule 2003

USGS	Description	Rugosité (m)	Albédo sol	Capacité thermique ($10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$)	Diffusivité thermique ($10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	Couvert végétal	Albédo canopée	LAI ($\text{m}^2 \text{ m}^{-2}$)	Résistance stomatale (s m^{-1})
1	Urbain dense	2,0	0,15	1,5	1	0,1	0,25	1	100
2	Champs et pâturages	0,8	0,19	1,0	0,4	0,5	0,25	2	100
6	Champs et forêts	1,2	0,19	1,0	0,4	0,5	0,25	2	100
7	Herbe haute	0,4	0,19	1,0	0,4	0,5	0,25	2	100
8	Herbe et broussailles	0,35	0,25	1,0	0,4	0,5	0,25	4	100
9	Vignobles	0,4	0,23	1,0	0,4	0,5	0,25	3	100
12	Forêt de feuillus	1,0	0,11	1,5	0,4	0,8	0,1	5	100
14	Forêt de conifères	2,0	0,10	1,5	0,4	0,8	0,1	5	200
15	Forêt mixte	1,5	0,12	1,5	0,4	0,8	0,1	5	150
16	Mer	0,001	0,09	4,2	0,25	0	-	-	-
19	Sol nu ou avec peu de végétation	0,1	0,3	0,75	0,6	0,1	0,25	0,5	100
24	Neige et glace	0,8	0,7	1,0	0,3	0	-	-	-
25	Urbain diffus	2,0	0,15	1,5	0,75	0,3	0,25	2	100

Tableau B.2-2. Paramètres de sol pour les 25 classes de sol de Metphomod (24 classes USGS + 1 classe urbain diffus) utilisés pour la simulation de la période de février 2005

USGS	Description	Rugosité (m)	Albédo sol	Capacité thermique ($10^6 \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-1}$)	Diffusivité thermique ($10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$)	Couvert végétal	Albédo canopée	LAI ($\text{m}^2 \text{ m}^{-2}$)	Résistance stomatale (s m^{-1})
1	Urbain dense	2,0	0,15	0,75	1	0,1	0,25	2	100
2	Champs et pâturages	0,2	0,19	1,0	0,5	0,2	0,25	1	100
6	Champs et forêts	0,75	0,19	1,0	0,5	0,2	0,25	1	100
7	Herbe haute	0,2	0,19	1,0	0,5	0,2	0,25	2	100
8	Herbe et broussailles	0,35	0,25	1,0	0,7	0,2	0,25	1	100
9	Vignobles	0,4	0,23	1,0	0,5	0,2	0,25	1	100
12	Forêt de feuillus	2,0	0,11	1,5	0,7	0,1	0,1	1	100
14	Forêt de conifères	2,0	0,10	1,5	0,7	0,8	0,1	4	200
15	Forêt mixte	2,0	0,12	1,5	0,7	0,4	0,1	2	150
16	Mer	0,01	0,09	4,2	0,0075	0	-	-	-
19	Sol nu ou avec peu de végétation	0,2	0,3	0,75	1,4	0,1	0,25	0,5	100
24	Neige et glace	0,1	0,7	4,2	0	0	-	-	-
25	Urbain diffus	1,5	0,15	0,75	0,8	0,15	0,25	2	100

Annexe B.3. Fichiers de paramètres MM5

Fichier terrain.deck pour Grenoble

```
#!/bin/csh -f
# terrain.csh
#
set echo
#
# Set this if you would like to ftp terrain data
#
set ftpdata = true
#set ftpdata = false
#
# Set the following for ftp'ing 30 sec elevation data from USGS ftp site
#
set Where30sTer = ftp
#set Where30sTer = /your-data-directory
if ( $Where30sTer == ftp) then
#
# Use this if you are ftping from other places
#
# set users = Others
#
# Use this if you are ftping from MMM/NCAR
#
# set users = Others
else
# set users = Others
endif
#
# Uncomment the following line if using the 30 - 100 cm layer soil file
#
# set BotSoil
#
# -----
# 1. Set up parameter statements
# -----
#
cat > src/parame.incl.tmp << EOF
C IIMX,JJMX are the maximum size of the domains, NSIZE = IIMX*JJMX
C PARAMETER (IIMX = 100, JJMX = 100, NSIZE = IIMX*JJMX)
EOF
cat > src/paramed.incl.tmp << EOF
C ITRH,JTRH are the maximum size of the terrain data.
C NOBT = ITRH*JTRH, here assuming
C ITRH= 270 ( 45 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C JTRH= 450 ( 75 deg. in north-south direction, 10 min. resolution)
C NOTE:
C IF USING GLOBAL 30SEC ELEVATION DATASET FROM USGS, NEED TO SET
C BOTH ITRH AND JTRH BIG. TRY THE COMMENTED PARAMETER LINE FIRST.
C THIS WILL REQUIRE APPROXI 0.9 GB MEMORY ON A 32-BIT IEEE MACHINE.
C AN ESTIMATE OF THE DIMENSION SIZE CAN BE MADE FROM Data30s/rdem.out
C AFTER THE FIRST JOB FAILS. USE (XMAXLAT-XMINLAT)*120 TO ESTIMATE
C ITRH, AND (XMAXLON-XMINLON)*120 TO ESTIMATE JTRH.
C
```



```

c     PARAMETER (ITRH = 500, JTRH = 500, NOBT = ITRH*JTRH)
C     PARAMETER (ITRH = 1500, JTRH = 1800, NOBT = ITRH*JTRH)
      PARAMETER (ITRH = 1200, JTRH = 1500, NOBT = ITRH*JTRH)
EOF
#
# -----
#           2. Set up NAMELIST
# -----
#
if ( -e terrain.namelist ) rm terrain.namelist
cat > terrain.namelist << EOF
&MAPBG
PHIC = 45.2,          ; CENTRAL LATITUDE (minus for southern hemesphere)
XLONC = 5.5,         ; CENTRAL LONGITUDE (minus for western hemesphere)
IEXP = .F.,         ; .T. EXPANDED COARSE DOMAIN, .F. NOT EXPANDED.
                   ; USEFUL IF RUNNING RAWINS/little_r
AEXP = 360.,        ; APPROX EXPANSION (KM)
IPROJ = 'LAMCON',   ; LAMBERT-CONFORMAL MAP PROJECTION
;IPROJ = 'POLSTR',  ; POLAR STEREOGRAPHIC MAP PROJECTION
;IPROJ = 'MERCAT',  ; MERCATOR MAP PROJECTION
&END
&DOMAINS
;
MAXNES = 2,         ; NUMBER OF DOMAINS TO PROCESS
NESTIX = 76, 70, 70, 85, 31, 221, ; GRID DIMENSIONS IN Y DIRECTION
NESTJX = 76, 70, 70, 85, 28, 221, ; GRID DIMENSIONS IN X DIRECTION
DIS = 18., 6., 2., 1.0, 1.0, 1.0, ; GRID DISTANCE
NUMNC = 1, 1, 2, 3, 3, 5, ; MOTHER DOMAIN ID
NESTI = 1, 26, 25, 15, 46, 50, ; LOWER LEFT I OF NEST IN MOTHER DOMAIN
NESTJ = 1, 26, 30, 32, 64, 50, ; LOWER LEFT J OF NEST IN MOTHER DOMAIN
RID = 1.5, 0.5, 0.25, 0.05, 3.1, 2.3, ; RADIUS OF INFLUENCE IN GRID UNITS (IFANAL=T)
NTYPE = 4, 5, 6, 6, 6, 6, ; INPUT DATA RESOLUTION
;
; 1: 1 deg (~111 km) global terrain and landuse
; 2: 30 min (~56 km) global terrain and landuse
; 3: 10 min (~19 km) global terrain and landuse
; 4: 5 min (~9 km) global terrain and landuse
; 5: 2 min (~4 km) global terrain and landuse
; 6: 30 sec (~.9 km) global terrain and landuse
;
NSTTYP= 1, 2, 2, 2, 2, 2, ; 1 -- ONE WAY NEST, 2 -- TWO WAY NEST
&END
&OPTN
IFTER = .TRUE., ; .T.-- TERRAIN, .F.-- PLOT DOMAIN MAPS ONLY
IFANAL = .F., ; .T.-- OBJECTIVE ANALYSIS, .F.-- INTERPOLATION
ISMTHTR = 2, ; 1: 1-2-1 smoother, 2: two pass smoother/desmoother
IFEZFUG = .F., ; .T. USE NCAR GRAPHICS EZMAP WATER BODY INFO TO FUDGE THE LAND USE
                   ; .F. USE LANDWATER MASK DATA
IFTFUG = .F., ; .T. DON'T DO EZFUDGE WITHIN THE USER-SPECIFIED
;               LAT/LON BOXES, need to define namelist fudget
IFFUDG = .F., ; .T. POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
;               need to define namelist fudge
IPRNTD = .TRUE., ; PRINT OUT LAT. AND LON. ON THE MESH
IPRHTH = .TRUE., ; PRINT OUT ALL PROCESSING FIELDS ON THE MESH
IPRINT = 0, ; = 1: A LOT MORE PRINT OUTPUT IN terrain.print.out
FIN = 100., 100., 100., 100., 100., 100., ; CONTOUR INTERVAL (meter) FOR TERRAIN HEIGHT
PLOT
;TRUELAT1=91., ; TRUE LATITUDE 1
;TRUELAT2=91., ; TRUE LATITUDE 2, use this if IPROJ='LAMCON'
IFILL = .TRUE., ; .TRUE. --- color filled plots

```

```

LSMDATA = .TRUE.,      ; .TRUE. --- Create the data for LSM
VEGTYPE = 1,          ; LANDUSE DATA TYPE: =0: old 13 cat; =1: 24 cat USGS; =2: 16 cat SiB
VSPLOT = .TRUE.,     ; .TRUE. --- plot Vege., Soil, Vege. Frc. percentages.
IEXTRA = .FALSE.,    ; .TRUE. --- Create extra data for Pleim-Xiu LSM
&END
&FUDGE
; USE ONLY IF IFFUDG = .T., POINT-BY-POINT FUDGING OF LANDUSE,
; IFFUG FOR EACH OF THE NESTS: .F. NO FUDGING, .T. FUDGING
IFFUG = .F.,.F.,.F.,.F.,.F.      ; FUDGE FLAGS
; NDFUG : THE NUMBER OF FUDGING POINTS FOR EACH OF NESTS
NDFUG = 0,0,
; LOCATION (I,J) AND LANDUSE VALUES FOR EACH OF THE NESTS
; NOTE: REGARDLESS OF IFFUG AND NDFUG, 200 VALUES MUST BE GIVEN FOR
;       EACH NEST, OR ELSE THE INDEXING WILL GET MESSED UP
; The example below is for two domains. Add more for domain 3 and up
;       if needed. Do not remove 0 values for domain 1 and/or 2 even
;       they are not used.
;
IFUG(1,1)= 200*0,      ; I location for fudge points in domain 1
IFUG(1,2)= 200*0,      ; I location for fudge points in domain 2
JFUG(1,1)= 200*0,      ; J location for fudge points in domain 1
JFUG(1,2)= 200*0,      ; J location for fudge points in domain 2
LNDFUG(1,1)= 200*0,    ; land-use value at fudge points for domain 1
LNDFUG(1,2)= 200*0,    ; land-use value at fudge points for domain 2
&END
&FUDGET
; USE ONLY IF IFTFUG=.T., WHICH MEANS TERRAIN WON'T DO EZFUDGE WITHIN
;   THE USER-SPECIFIED LAT/LON BOXES. THIS OPTION IS USED WHEN THERE
;   ARE INLAND BODIES OF WATER THAT ARE DEFINED IN THE LAND USE
;   DATA SET BUT NOT IN THE EZMAP DATA SET. THIS OPTION PREVENTS
;   THOSE BODIES OF WATER FROM BEING WIPED OUT BY EZFUDGE
NFUGBOX = 2            ; NUMBER OF SUBDOMAINS IN WHICH TO
;                       TURN OFF EZMAP LAND USE FUDGING
STARTLAT=40.5,43.5,    ; LATITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
ENDLAT =56.5,47,       ; LATITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
STARTLON=-10,3.5,     ; LONGITUDES OF LOWER-LEFT CORNERS OF SUBDOMAINS
ENDLON =22,7.5,       ; LONGITUDES OF UPPER-RIGHT CORNERS OF SUBDOMAINS
&END
&EZFUDGE
; USE ONLY IF IFEZFUG=.T., WHICH TURNS ON EZMAP WATER BODY FUDGING OF LANDUSE.
; USERS: FEEL FREE TO ADD ANY MORE LAKE SURFACE HEIGHTS THAT YOU'LL NEED.
; HTPS IS THE HEIGHT IN METERS AND THE INDEX OF HTPS CORRESPONDS TO THE ID
; OF THE 'PS' AREA IN THE FILE ezmap_area_ids.
;
HTPS(441) = -.001      ; Oceans -- Do NOT change this one
HTPS(550) = 183.       ; Lake Superior
HTPS(587) = 177.       ; Lakes Michigan and Huron
HTPS(618) = 176.       ; Lake St. Clair
HTPS(613) = 174.       ; Lake Erie
HTPS(645) = 75.        ; Lake Ontario
HTPS(480) = 1897.      ; Lake Tahoe
HTPS(500) = 1281.      ; Great Salt Lake
&END
EOF
#
# -----
#
#                               END OF USER MODIFICATION
#
# -----

```

```

#
#   Check to see if recompilation is needed
#   Need to make here so that rdnml may be used
#
cd src
../Templates/incldiff.sh parame.incl.tmp parame.incl
../Templates/incldiff.sh paramed.incl.tmp paramed.incl
cd ..
make >& make.terrain.out
#
#   Create a namelist without comments
#
sed -f Templates/no_comment.sed terrain.namelist | grep "[A-Z,a-z]" > terlif.tmp
mv terlif.tmp terrain.namelist
#
#   Set default script variables
#
set LandUse = OLD
#
set DataType = `src/rdnml < terrain.namelist`
echo $DataType
#
if ( $DataType[4] == 1 ) set IfProcData
if ( $DataType[4] == 0 ) set ftpdata = false
if ( $DataType[5] == 1 ) set LandUse = USGS
if ( $DataType[5] == 2 ) set LandUse = SiB
if ( $DataType[3] == 1 ) set IfUsgsTopo
#
#   reset LandUse if $BotSoil is set
#   -- use bottom soil files
#
if ( $?BotSoil ) set LandUse = USGS2
#
#   link to Fortran units
#
set ForUnit = fort.
rm ${ForUnit}1* ${ForUnit}2* ${ForUnit}4*
#
if ( $LandUse == OLD )   cat Data/namelist.usgsdata >> terrain.namelist
if ( $LandUse == USGS ) cat Data/namelist.usgsdata >> terrain.namelist
if ( $LandUse == USGS2 ) cat Data/namelist.usgsdata2 >> terrain.namelist
if ( $LandUse == SiB )   cat Data/namelist.sibdata >> terrain.namelist
cat > endnml << EOF
&END
EOF
cat endnml >> terrain.namelist
rm endnml
#
ln -s terrain.namelist      ${ForUnit}15
ln -s ezids                 ${ForUnit}18
ln -s raobsta.ieee         ${ForUnit}16
# -----
#
#   Update parameter statements for vegetation dataset
#   (may require partial recompilation)
#
if ( $LandUse == SiB ) then

cp src/paramesv0.incl src/paramesv.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/paramesv.incl.tmp src/paramesv.incl

```

```

cp src/vs_data0.incl src/vs_data.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/vs_data.incl.tmp src/vs_data.incl
make >& make2.print.out

else if ( $LandUse == USGS ) then

cp src/paramesv1.incl src/paramesv.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/paramesv.incl.tmp src/paramesv.incl
cp src/vs_data2.incl src/vs_data.incl.tmp
./Templates/incldiff.sh src/vs_data.incl.tmp src/vs_data.incl
make >& make2.print.out

endif
# -----
#
#   should I ftp the data?
#
if ( $ftpdata == true && $?BotSoil ) then
# ftp other data plus top soil data
echo 'about to start ftping'
cp Data/ftp2.csh ftp.csh
chmod +x ftp.csh
./ftp.csh >& ftp.out
# rm ftp.csh ftp.out
else
# ftp other data plus bottom soil data
echo 'about to start ftping'
cp Data/ftp.csh ftp.csh
chmod +x ftp.csh
./ftp.csh >& ftp.out
# rm ftp.csh ftp.out
endif
#
if ( $?IfUsgsTopo && $?IfProcData ) then
echo 'about to start ftping 30 sec tiled elevation data from USGS'
cp Data/ftp30s.csh .
chmod +x ftp30s.csh
./ftp30s.csh $Where30sTer $users >& ftp30s.out
# rm ftp30s.csh ftp30s.out
endif
# -----
#
#   Execute terrain
#
unlimit
echo 'Run terrain.exe'
date
./terrain.exe >&! terrain.print.out
#
rm ${ForUnit}*

```

Fichier configure.user

```

SHELL =          /bin/sh
.SUFFIXES: .F .i .o .f
RUNTIME_SYSTEM = "linux"
LIBINCLUDE = $(DEVTOP)/include
FC = $(F90)
FCFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -O3 -unroll -ip -w -rcd
CPP = /lib/cpp
CFLAGS = -O
CPPFLAGS = -I$(LIBINCLUDE) -P
LDOPTIONS = $(FCFLAGS)
LOCAL_LIBRARIES =
MAKE = make -i -r
AR = ar ru
RM = rm -f
RM_CMD = $(RM) *.CKP *.ln *.BAK *.bak *.o *.i core errs ,* *~ *.a \
.emacs_* tags TAGS make.log MakeOut *.f !
GREP = grep -s
CC = cc
FDDAGD = 1
FDDAOPS = 0
MAXNES = 2
MIX = 76
MJX = 76
MKX = 27
IMPHYS = "8,8,8,8,1,1,1,1,1,1"
MPHYSTBL = 0
- None,Kuo,Grell,AS,FC,KF,BM,KF2 - 1,2,3,4,5,6,7,8
ICUPA = "2,1,1,1,1,1,1,1,1,1"
IBLTYP = "5,5,5,5,2,2,2,2,2,1"
FRAD = "1,0,0,0,0"
l=polar (7-layer snow/soil model)
IPOLAR = 0
ISOIL = 1
ISHALLO = "0,0,0,0,0,0,0,0,0,0"
.c.o:
    $(RM) $@ && \
    $(CC) -c $(CFLAGS) $*.c
.F.o:
    $(RM) $@
    $(FC) -c $(FCFLAGS) $*.F
.f.o:
    $(RM) $@
    $(FC) -c $(FCFLAGS) $*.f

```

Fichier mm5.deck

```
#!/bin/sh
#
# Version 3 of mm5 job deck
#
# The mm5 executable (mm5.exe) expects to find the following files
#   in the Run/ directory:
#   MMINPUT_DOMAIN1  -|
#   BDYOUT_DOMAIN1   | --> output files from Interpf
#   LOWBDY_DOMAIN1  -|
#   TERRAIN_DOMAIN1[2,3..] if running nests --> output from Terrain
#
# If it is a restart run:
#   RESTART_DOMAIN1[,2,3..] --> output from MM5 run: renamed from
#                               SAVE_DOMAIN1[,2,3...]
#
# If it is gridded FDDA run with surface analysis nudging:
#   SFCFDDA_DOMAIN1[2,3,...]
#
# If it is observational nudging run:
#   MM5OBS_DOMAIN1[,2,3..] --> user-created observation files
#
# Output from a MM5 run:
#   If IFTAPE = 1
#   MMOUT_DOMAIN1[,2,3...] --> one output for each domain
#   If IFSAVE = TRUE
#   SAVE_DOMAIN1[,2,3...]
#
#
# temp files should be accessible
umask 022
#
# Select appropriate FDDAsw if doing gridded analysis FDDA
#
#FDDAsw=yes           # gridded FDDA input switch
FDDAsw=no
#
# Sections
# 1. Options for namelist ("mmlif")
# 2. Running...
#
#-----
# 1. Options for namelist ("mmlif")
#-----
#
#       The first dimension (column) of the arrays denotes the domain
#       identifier.
#           Col 1 = Domain #1, Col 2 = Dom #2, etc.
#
cat > ./Run/oparam << EOF
&OPARAM
;
; ***** FORECAST TIME AND TIME STEP *****
;
TIMAX = 23100.,           ; forecast length in minutes
TISTEP = 45,             ; coarse domain DT in model, use 3*DX
;
; ***** OUTPUT/RESTART OPTIONS *****
```



```

;                               currently for IFRAD = 1,2
IEVAP = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ;evap of cloud/rainwater - <0, 0, >0
;                               (currently for IMPHYS=3,4,5 only)
ISMRD = 0,                       ;soil moisture initialization by PX LSM:
;                               =0, use moisture avail from LANDUSE.TBL;
;                               =2, use soil moisture from REGRID
; Next two switches for new version of NOAH LSM (ISOIL=2)
RDMAXALB=.FALSE.                 ;use climo maximum snow albedo (not landuse table)
RDBRDALB=.FALSE.                 ;use monthly climo background albedo (not landuse
table)
;
EOF
cat > ./Run/nparam << EOF
&NPARAM
;
; ***** NEST AND MOVING NEST OPTIONS *****
;
LEVIDN = 0,1,2,3,1,1,1,1,1,1,1,      ; level of nest for each domain
NUMNC = 1,1,2,3,1,1,1,1,1,1,1,      ; ID of mother domain for each nest
NESTIX = 76, 70, 70, 85, 31, 221, ; GRID DIMENSIONS IN Y DIRECTION
NESTJX = 76, 70, 70, 85, 28, 221, ; GRID DIMENSIONS IN X DIRECTION
NESTI = 1, 26, 25, 15, 46, 50, ; LOWER LEFT I OF NEST IN MOTHER DOMAIN
NESTJ = 1, 26, 30, 32, 64, 50, ; LOWER LEFT J OF NEST IN MOTHER DOMAIN
XSTNES = 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., ;domain initiation
XENNES =23100.,23100.,23100.,23100.,720.,720.,720.,720.,720.,720.; domain termination
IOVERW = 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; overwrite nest input
; 0=interpolate from coarse mesh (for nest domains);
; 1=read in domain initial conditions
; 2=read in nest terrain file
IACTIV = 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ;
; in case of restart: is this domain active?
;
; ***** MOVING NEST OPTIONS *****
;
IMOVE = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; move domain 0,1
IMOVCO = 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, ; 1st move #
; imovei(j,k)=L, ; I-INCREMENT MOVE (DOMAIN J, MOVE NUMBER K) IS L
IMOVEI = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #1
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #2
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #3
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #4
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; I move #5
IMOVEJ = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #1
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #2
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #3
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #4
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; J move #5
IMOVET = 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; time of move #1
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; time of move #2
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; time of move #3
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; time of move #4
; 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, ; time of move #5
IFEED = 3, ; no feedback; 9-pt weighted average; 1-pt feedback w/o smoothing /
; light smoothing / heavy smoothing - 0,1,2,3, and 4
&END
EOF
cat > ./Run/pparam << EOF
&PPARAM
;
; ***** MISCELLANEOUS OPTIONS *****

```



```

GT=4.E-4 0.,0.,      ; 3D ANALYSIS NUDGING
  0.,0.,0.,          ; SFC ANALYSIS NUDGING
;
IMOIS=1,0,0         ; 3D ANALYSIS NUDGING
  0,0,0             ; SFC ANALYSIS NUDGING
;
;      NUDGING COEFFICIENT FOR THE MIXING RATIO ANALYSES
GQ=6.0E-5,0.,0.     ; 3D ANALYSIS NUDGING
  0.,0.,0.          ; SFC ANALYSIS NUDGING
;
;      GRID NUDGE THE ROTATIONAL WIND FIELD? 0 = NO; 1 = YES
IROT=0,0,0          ; 3D ANALYSIS NUDGING
;
;      NUDGING COEFFICIENT FOR THE ROTATIONAL COMPONENT OF THE WINDS
GR=5.0E6,0.,0.      ; 3D ANALYSIS NUDGING
;
;      IF GRID NUDGING (I4D(1,1)=1) AND YOU WISH TO EXCLUDE THE
;      BOUNDARY LAYER FROM FDDA OF COARSE GRID THREE DIMENSIONAL
;      DATA (USUALLY FROM INTERP),
;      0 = NO,  INCLUDE BOUNDARY LAYER NUDGING
;      1 = YES, EXCLUDE BOUNDARY LAYER NUDGING
INONBL =1,1,1       ; U WIND
          1,1,1       ; V WIND
          1,1,1       ; TEMPERATURE
          1,1,1       ; MIXING RATIO
;
;      RADIUS OF INFLUENCE FOR SURFACE ANALYSIS (KM) .
;      IF I4D(2,1)=1 OR I4D(2,2)=1, ETC, DEFINE RINBLW (KM) USED
;      IN SUBROUTINE BLW TO DETERMINE THE HORIZONTAL VARIABILITY
;      OF THE SURFACE-ANALYSIS NUDGING AS A FUNCTION OF SURFACE
;      DATA DENSITY.  OVER LAND, THE STRENGTH OF THE SURFACE-
;      ANALYSIS NUDGING IS LINEARLY DECREASED BY 80 PERCENT AT
;      THOSE GRID POINTS GREATER THAN RINBLW FROM AN OBSERVATION
;      TO ACCOUNT FOR DECREASED CONFIDENCE IN THE ANALYSIS
;      IN REGIONS NOT NEAR ANY OBSERVATIONS.
RINBLW=250.,
;
;      SET THE NUDGING PRINT FREQUENCY FOR SELECTED DIAGNOSTIC
;      PRINTS IN THE GRID (ANALYSIS) NUDGING CODE (IN CGM
;      TIMESTEPS)
NPFG=200,
;
;      ***** OBSERVATION NUDGING *****
;
;      INDIVIDUAL OBSERVATION NUDGING.  VARIABLES THAT ARE ARRAYS
;      USE THE FIRST DIMENSION (COLUMN) AS THE DOMAIN IDENTIFIER:
;      COLUMN 1 = DOMAIN #1, COLUMN 2 = DOMAIN #2, ETC.
;
;      IS THIS INDIVIDUAL OBSERVATION NUDGING? 0 = NO; 1 = YES
I4DI  =0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
;
;      OBS NUDGE THE WIND FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISWIND =1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
;
;      NUDGING COEFFICIENT FOR WINDS FROM STATION DATA
GIV  =10.E-5,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
;
;      OBS NUDGE THE TEMPERATURE FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISTEMP=1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,

```

```

;
;   NUDGING COEFFICIENT FOR TEMPERATURES FROM STATION DATA
GIT  =4.E-4,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
;
;   OBS NUDGE THE MIXING RATIO FIELD FROM STATION DATA? 0 = NO; 1 = YES
ISMOIS=1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,
;
;   NUDGING COEFFICIENT FOR THE MIXING RATIO FROM STATION DATA
GIQ  =4.E-4,4.E-4,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,
;
;   THE OBS NUDGING RADIUS OF INFLUENCE IN THE
;   HORIZONTAL IN KM FOR CRESSMAN-TYPE DISTANCE-WEIGHTED
;   FUNCTIONS WHICH SPREAD THE OBS-NUDGING CORRECTION
;   IN THE HORIZONTAL.
RINXY=240.,
;
;   THE OBS NUDGING RADIUS OF INFLUENCE IN THE
;   VERTICAL IN SIGMA UNITS FOR CRESSMAN-TYPE DISTANCE-
;   WEIGHTED FUNCTIONS WHICH SPREAD THE OBS-NUDGING
;   CORRECTION IN THE VERTICAL.
RINSIG=0.001,
;
;   THE HALF-PERIOD OF THE TIME WINDOW, IN MINUTES, OVER
;   WHICH AN OBSERVATION WILL AFFECT THE FORECAST VIA OBS
;   NUDGING. THAT IS, THE OBS WILL INFLUENCE THE FORECAST
;   FROM TIMEOBS-TWINDO TO TIMEOBS+TWINDO. THE TEMPORAL
;   WEIGHTING FUNCTION IS DEFINED SUCH THAT THE OBSERVATION
;   IS APPLIED WITH FULL STRENGTH WITHIN TWINDO/2. MINUTES
;   BEFORE OR AFTER THE OBSERVATION TIME, AND THEN LINEARLY
;   DECREASES TO ZERO TWINDO MINUTES BEFORE OR AFTER THE
;   OBSERVATION TIME.
TWINDO=40.0,
;
;   THE NUDGING PRINT FREQUENCY FOR SELECTED DIAGNOSTIC PRINT
;   IN THE OBS NUDGING CODE (IN CGM TIMESTEPS)
NPFI=20,
;
;   FREQUENCY (IN CGM TIMESTEPS) TO COMPUTE OBS NUDGING WEIGHTS
IONF=2,
IDYNIN=0, ;for dynamic initialization using a ramp-down function to gradually
;   turn off the FDDA before the pure forecast, set idynin=1 [y=1, n=0]
DTRAMP=60.,;the time period in minutes over which the
;   nudging (obs nudging and analysis nudging) is ramped down
;   from one to zero. Set dtramp negative if FDDA is to be ramped
;   down BEFORE the end-of-data time (DATEND), and positive if the
;   FDDA ramp-down period extends beyond the end-of-data time.
&END
EOF
#
#-----
#
#   create namelist: mmlif, and remove comments from namelist:
#
make mmlif
cd ./Run
sed -f ../Util/no_comment.sed mmlif | grep [A-Z,a-z] > mmlif.tmp
mv mmlif.tmp mmlif
rm fparam lparam nparam oparam pparam
#
#   copy gridded FDDA files

```

```
#
# if [ $FDDAsw = yes ]; then
#   echo "Copy grid fdda file"
#   for i in MMINPUT_DOMAIN[1-9]
#   do
#     Num=`echo $i | grep [1-9]$ | sed 's/.*\(\.\)/\1/'`
#     cp $i MMINPUT2_DOMAIN$Num
#     echo "cp $i MMINPUT2_DOMAIN$Num"
#   done
# fi
#
#-----
#
#       run MM5
#
date
#time ./mm5.exe
# ${MPICH}/mpich-1.2.6/bin/mpirun -np 2 mm5.mpp
```


Annexe C. Utilisation de la chaîne de modélisation modèle pour l'étude prospective de scénarios d'émissions à 2010

La demande exprimée pour le PPA était de simuler la période du 1^{er} au 15 août 2003 avec 6 jeux d'émissions différents : le cas de base 2003 et 5 scénarios.

Hypothèses ayant servi à la construction des scénarios

La PPA permet de réaliser des actions locales volontaristes pour les 5 prochaines années, voire d'accompagner afin de les amplifier des actions décidées à une échelle plus large, européenne ou nationale. Il convient donc d'estimer à leurs justes valeurs les contributions des législations européennes et nationales dans le processus de diminution des émissions. Ainsi, en ce qui concerne l'évolution des émissions unitaires dans le domaine des transports, le PPA grenoblois est-il entièrement dépendant des directives EURO. En revanche le renouvellement du parc est plus au moins dynamique en fonction de taux de croissance économique par exemple, donnée très dépendante de l'économie nationale. En revanche, le nombre de km parcourus dans une agglomération peut être fortement influencé par les orientations locales, notamment le Plan de Déplacement Urbain.

Par ailleurs, il doit s'accorder avec les engagements de la France dans le domaine des plafonds d'émissions, repris en partie dans le Plan Air présenté en novembre 2003. Les groupes de travail du PPA ont donné notamment comme orientation une bonne adéquation de la contribution par habitant du grenoblois avec le français moyen. Lors de la mise en place des discussions européennes sur les directives plafond, comme lors de l'annonce du plan air, des hypothèses ont été formulées pour le territoire national à 2010, et mises en forme dans le rapport dit OPTINEC (juillet 2002). Des simulations réalisées au niveau national (cf. plan air) sur la base de l'été 2003 ont montré que le respect du plan air, notamment sur les précurseurs de l'ozone (COV et NOx), permettaient de diminuer d'un facteur 5 les pointes horaires de seuils d'information et de recommandation. Les hypothèses prises pour les jeux de simulation sur les émissions partent des hypothèses du rapport OPTINEC. Toutefois, ces dernières peuvent paraître optimistes dans certains cas, compte tenu de l'évolution connues sur les 3 dernières années. L'ASCOPARG a donc souhaité que soit testés, notamment sur les transports, un jeu de simulation « alternatif », en proposant une hypothèse dite haute sur laquelle l'efficacité du renouvellement du parc automobile serait réduite. Ces jeux d'émissions ont été utilisés pour les calculs réalisés à l'aide du modèle Metphomod. Les cinq scénarios testés ont été définis avec deux hypothèses sur les transports (trafic bas et trafic haut) mixées aux deux hypothèses sur l'apport des autres sources (basses et moyennes) et des territoires extérieurs à la zone PPA (contribution haute sur la basse de l'année 2001 et

contribution basse sur la base de l'année 2010). Les 5 scénarios sont récapitulés dans le tableau C-1.

Territoire PPA :

Hypothèses transports

- Trafic bas : augmentation du nombre de kilomètres parcourus par les véhicules particuliers de 1,6%, utilitaires légers 44,5%, poids lourds -1,1%, les bus et autres TC 34,3%, les deux roues 3,6%, avec un renouvellement du parc qui produit son plein effet (croissance économique à 2,3% par an). Il s'agit d'un scénario volontariste en matière environnementale.
- Trafic haut : augmentation du nombre de kilomètres parcourus par les véhicules particuliers de 20,8%, utilitaires légers 34,3%, poids lourds 18,9%, les bus et autres TC 28,9%, les deux roues 3,6%, avec un renouvellement du parc qui s'arrête en 2005. Il s'agit d'un scénario pessimiste.

Hypothèses hors transports

- Hypothèse moyenne : seules les actions prévues dans le PPA sont effectivement mise en œuvre
- Hypothèse basse : les réductions d'émissions respectent rigoureusement les préconisations de la directive plafond en plus du PPA

Territoire régional :

- Hypothèse haute : les émissions 2010 restent identiques à celles de 2003
- Hypothèse basse : les réductions d'émissions respectent les préconisations de la directive plafond

Contribution des territoires extérieurs au territoire modélisé :

Le territoire modélisé n'est pas le seul à produire des émissions, et des influences soit de précurseurs ou des apports directs d'ozone sont possibles. Ce niveau dit « de fond » dépendra étroitement en 2010 de l'efficacité des plans de réduction à l'échelle européenne, voire au-delà. Deux hypothèses sont testées sur cette échelle internationale appelée « Europe » :

- Hypothèse haute : optimiste, elle considère que la directive plafond a produit l'ensemble de ses effets en 2010 et que ces avancées n'ont pas été perturbées par des augmentations extérieures à la communauté européenne ;
- Hypothèse basse : la contribution « Europe » est la même en 2010 qu'en 2003 : il s'agit d'un scénario résolument pessimiste, afin de montrer l'effet levier représenté par des réductions sur des larges échelles.

Tableau C-1. Résumé des hypothèses utilisées pour la définition des scénarios PPA

	Zone PPA	Région	Europe
Scénario n°1	Trafic : bas Autres sources : basse	Trafic : bas Autres sources : basse	Contribution externe : basse
Scénario n°2	Trafic : bas Autres sources : moyenne	Trafic : bas Autres sources : basse	Contribution externe : basse
Scénario n°3	Trafic : haut Autres sources : moyenne	Trafic : haut Autres sources : basse	Contribution externe : basse
Scénario n°4	Trafic : bas Autres sources : moyenne	Trafic : bas Autres sources : haute	Contribution externe : haute
Scénario n°5	Trafic : haut Autres sources : moyenne	Trafic : haut Autres sources : haute	Contribution externe : haute

Le modèle CHIMERE a été utilisé avec deux jeux d'émissions différents :

Pour prendre en compte la contribution haute à l'échelle de l'Europe, l'inventaire EMEP (<http://www.emep.int>) pour l'année de référence 2001 est utilisée dans le grand domaine de CHIMERE

Pour prendre en compte la contribution basse à l'échelle de l'Europe, l'inventaire EMEP pour l'année de référence 2010 (cf. site web EMEP) est utilisé dans le grand domaine de CHIMERE

Résultats des simulations des 5 scénarios d'émissions testés

Comme montré sur la figure C-1, la simulation 2003 reproduit bien l'ensemble des pointes de pollution au regard des mesures, avec un écart moyen de $16 \mu\text{g}/\text{m}^3$, soit inférieur à 10% de la mesure au seuil d'information et de recommandation (plage d'incertitude).

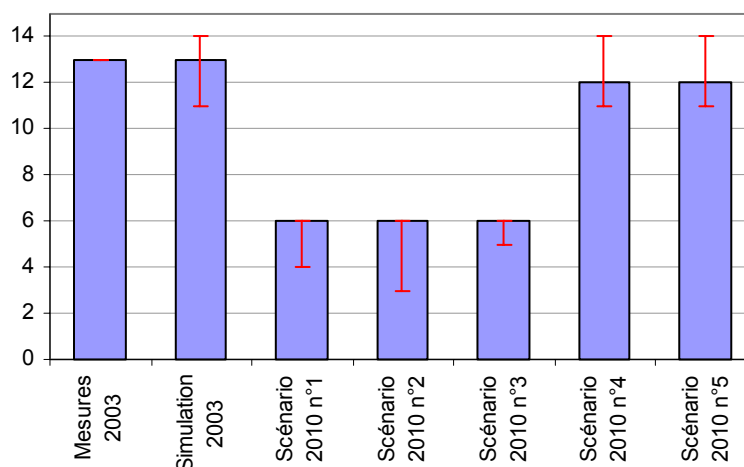


Figure C-1. Nombre de dépassements mesurés et simulés pour les différents scénarios avec une barre d'erreur correspondant à une incertitude de $5 \mu\text{g}/\text{m}^3$

Pour ce qui concerne 2010, ce sont les simulations 1 à 3, pour lesquelles les réductions d'émissions sont les plus optimistes, qui conduisent au plus grand nombre d'abattelements de pointes d'ozone (de 13 à 6, soit 54%), tandis que les simulations 4 et 5, les plus pessimistes pour les contributions externes, n'économisent qu'un seul dépassement. En tenant compte d'une l'incertitude de $5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ sur les résultats de simulation, le scénario 2 pourrait aboutir à seulement 3 dépassements.

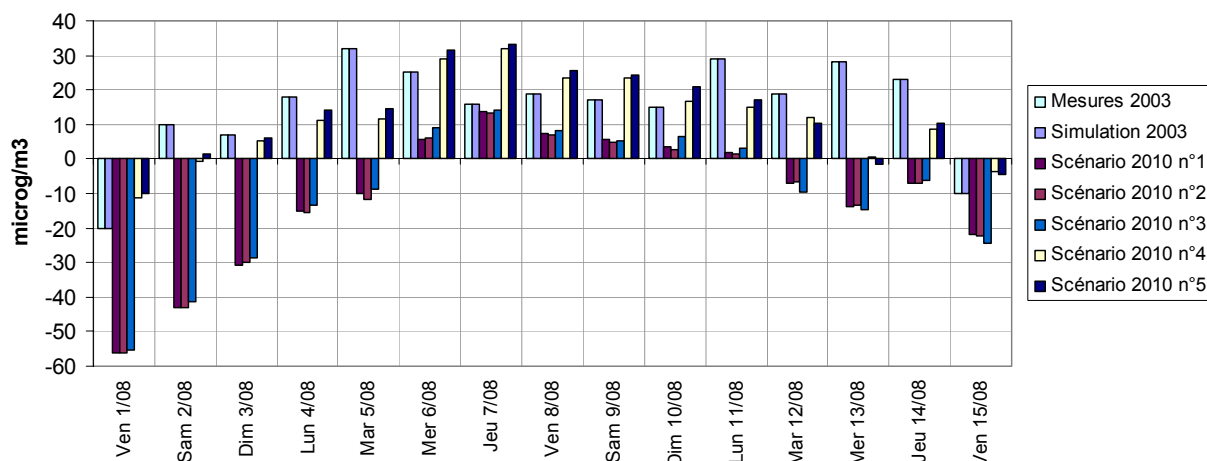


Figure C-2. Dépassements absolus du seuil de $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$ (valeurs positives) mesurés et simulés

Il apparaît donc nettement que la réussite du plan grenoblois dépend directement des efforts qui seront réalisés de manière associée sur les autres territoires européens. Il convient de remarquer que ces hypothèses sont des cas théoriques, la contribution européenne étant composée d'un ensemble de contributions locales comme celle de Grenoble. Les scénarios 1, 2 et 3 montrent les mêmes performances en absolu par rapport au dépassement du seuil d'information et de recommandation de $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$, ils ne se distinguent que par l'amplitude du dépassement et la superficie du territoire touché (figure C-2). Les scénarios 1 et 2 sont peu différents, ce qui montre le respect des objectifs fixés. Le scénario 3 montre des performances à peine dégradées, les hypothèses hautes et basses ont donc une incidence limitée si elles se limitent à un territoire restreint. Les mesures prises, même dans les cas les plus optimistes ne permettent pas d'atteindre la performance de réduction de 80% simulée au niveau national, dans l'absolu, mais elles permettent de les obtenir en tenant compte d'une incertitude de 10%, les dépassements observés dans les scénarios 1 à 3 se situant dans cette incertitude.

Conclusion

L'utilisation de la chaîne PREVALP pour réaliser une évaluation de l'impact de réductions des émissions dans le cadre du PPA de Grenoble a permis de mettre en lumière l'importance d'une réduction des émissions au niveau européen et de la région. Cette étude théorique a montré que des réductions d'émission à l'intérieur de la zone PPA uniquement ont peu

d'impact s'ils ne sont pas appliqués dans le cadre d'actions de niveau national et européen. Aucun scénario n'a cependant investigué la réduction des émissions au seul niveau de la région Rhône-Alpes pour connaître l'impact d'une réduction purement régionale.

Les incertitudes associées aux simulations ne sont pas fournies dans le présent rapport car elles restent à être évaluées. L'utilisation de nombreux modèles emboîtés génère des incertitudes qui peuvent être importantes. Des tests de sensibilité des différents modèles permettront à l'avenir d'associer des incertitudes aux résultats.

Il est important de citer que le travail réalisé pour la réalisation du PPA sur la chaîne PREVALP a permis, en parallèle, le développement et l'amélioration de la chaîne de calcul PREVALP (<http://www.prevalp.fr.fm>) qui est une version simplifiée de la chaîne PREVALP dédiée à la prévision. L'application à des fins réglementaires d'un outil issu de travaux de recherche encourage la poursuite du développement et l'amélioration de la fiabilité de tels outils de modélisation.

Annexe D. Article IJEP

Chaxel, E., J.-P. Chollet, G. Brulfert, and C. Chemel, Production of ozone in the Chamonix Valley (France), *International Journal of Environment and Pollution*, 24, 201-217, 2005.

