



HAL
open science

Modélisation numérique et assimilation de données de la dispersion de radionucléides en champ proche et à l'échelle continentale

Monika Krysta

► **To cite this version:**

Monika Krysta. Modélisation numérique et assimilation de données de la dispersion de radionucléides en champ proche et à l'échelle continentale. Modélisation et simulation. Université Paris XII Val de Marne, 2006. Français. NNT : 2006PA120022 . tel-00652840

HAL Id: tel-00652840

<https://theses.hal.science/tel-00652840>

Submitted on 16 Dec 2011

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 de doctorat
de l'Université Paris XII - Val de Marne**

Présentée par
Monika KRYSTA

**Modélisation numérique et assimilation de données
de la dispersion de radionucléides
en champ proche et à l'échelle continentale**

Spécialité
Chimie de la Pollution Atmosphérique et Physique de l'Environnement

Soutenue le 14 septembre 2006 devant le jury composé de :

Pr Hervé de Feraudy	Université de Versailles-Saint Quentin en Yvelines	président
Pr François-Xavier Le Dimet Dr Marc Bocquet	Université Joseph Fourier École Nationale des Ponts et Chaussées	directeur de thèse co-directeur de thèse
Pr Richard Perkins Dr Janusz Pudykiewicz	École Centrale de Lyon Environnement Canada	rapporteur rapporteur
Dr Anda Ionescu Dr Olivier Isnard	Université Paris XII Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire	examineur examineur

Dedykuję Dziadkowi

Remerciements

Je tiens, tout d'abord, à remercier Bruno Sportisse qui m'a proposé de faire cette thèse, qui s'est beaucoup engagé pour que je puisse avoir une bourse, qui m'a ensuite accueilli dans son laboratoire, qui m'a souvent conseillé et qui m'a permis de finir ce travail dans des très bonnes conditions.

Toute ma gratitude va également à Marc Bocquet qui a encadré mon travail, qui m'a donné l'opportunité de travailler sur une très élégante approche du maximum d'entropie et qui m'a appris beaucoup de choses. Je te remercie Marc non seulement pour la qualité du travail que nous avons fait ensemble mais également pour ta disponibilité et ta loyauté.

Un grand merci à Olivier Isnard qui a inspiré le sujet de ma thèse. Ta bonne humeur Olivier fait que c'est toujours un plaisir de te rencontrer et de discuter avec toi.

Je remercie François-Xavier Le Dimet pour la confiance qu'il m'a faite en acceptant d'être le directeur de ma thèse.

Je remercie Hervé de Feraudy de m'avoir dirigé vers Bruno et le CEREА et de m'avoir fait honneur de présider mon jury de thèse quatre ans plus tard.

Je suis profondément reconnaissante à Richard Perkins et à Janusz Pudykiewicz qui ont accepté la tâche d'être rapporteurs de mes travaux de thèse, ainsi qu'à tous les autres membres du jury, et parmi eux notamment Anda Ionescu, qui ont consacré leur temps à examiner mon manuscrit de thèse et à participer à ma soutenance.

J'ai eu le plaisir de beaucoup collaborer avec Denis Quélo. Je te remercie Denis pour toute ton aide scientifique et informatique, tes explications, tes réponses à mes questions les plus bêtes et tes conseils toujours bons.

J'ai toujours eu de la chance d'avoir des collègues de bureau formidables, que ce soient Denis Quélo et Edouard Debry tout au début ou Rachid Abida et Janusz Zyśk vers la fin. Mais avant tout je tiens à remercier Yelva Roustan et Vivien Mallet avec qui j'ai partagé mon bureau pendant trois ans. Je vous suis reconnaissante pour l'ambiance studieuse, pour toute votre aide et pour les échanges d'opinions.

Je remercie Karine Barres pour toute l'aide que j'ai reçue de sa part, sa rapidité et efficacité dans la résolution de problèmes.

À côté de Marc et Bruno il y avait plusieurs personnes qui ont relu cette thèse. Je remercie vivement Bruno Granger, Denis Quélo, Vivien Mallet ainsi que Yelva Roustan, Marilyne Tombette, Edouard Debry et Nikki Vercauteren pour leur temps, et leurs corrections. Mais ce sont tous mes collègues sans exception qui à un point ou un autre m'ont aidé à formuler des e-mails importants et à corriger des fautes de français.

Je suis reconnaissante à tous mes collègues du CEREА, que ce soit du côté ENPC ou EDF pour leurs soutien et amitié.

Finalement, je remercie l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN) qui a financé ces travaux en les commandant auprès du CEREА dans le cadre d'un projet commun concernant la modélisation inverse d'un rejet radioactif (MIRA).

Résumé

La prévision des conséquences de rejets radioactifs dans l'atmosphère repose sur des modèles de dispersion qui fournissent des solutions analytiques (PX 0.1 développé par IRSN/ECL) ou numériques (POLAIR3D développé au CEREAs) de l'équation d'advection-diffusion. Les modèles s'appuient d'une part sur des champs météorologiques possédant une résolution limitée et intègrent d'autre part des processus d'appauvrissement d'un nuage radioactif dont la description est imparfaite. Afin de contourner ces difficultés nous exploitons dans cette thèse les opportunités offertes par le couplage des modèles aux mesures, connu sous le nom d'assimilation de données.

Dans un premier temps nous confrontons les modèles utilisés à des observations. Ces dernières sont fournies par des expériences effectuées avec des traceurs passifs ou collectées suite à des rejets de radionucléides. La dispersion sur une maquette de la centrale de Bugey dans une soufflerie en champ proche, l'expérience ETEX-I à l'échelle continentale et les rejets accidentels de Tchernobyl et Algésiras font l'objet d'études dans ce travail.

Dans un deuxième temps, les modèles de dispersion sont associés aux mesures dans le but d'améliorer l'évaluation de conséquences de rejets radioactifs et d'inverser leur sources si la qualité du modèle le permet. En champ proche, l'approche variationnelle standard est utilisée. L'adjoint de PX 0.1 est construit à l'aide d'un différenciateur automatique. Les mesures collectées dans la soufflerie sont assimilées afin d'inverser le débit de la source. Dans le but d'obtenir un meilleur accord entre le modèle et les mesures, l'optimisation des paramètres gouvernant la distribution spatiale du panache est ensuite abordée. L'avantage de l'emploi de mesures est conditionné par leur contenu informatif. Ainsi, l'analyse a posteriori du réseau de mesures est effectuée et des possibilités de réduire sa taille en vue des applications opérationnelles sont exploitées.

À l'échelle continentale, malgré la restriction aux mailles contenant des sites nucléaires, l'espace engendré par des sources est de dimension considérablement plus grande que l'espace d'observations. Par conséquent le problème inverse de reconstruction de la position et du profil temporel des sources est mal posé. Ce problème est régularisé en utilisant le principe du maximum d'entropie sur la moyenne. Des nouvelles fonctions coût prenant en compte le confinement spatio-temporel des sources accidentelles sont construites dans l'espace d'observations. Le lien entre la source recherchée et les mesures est décrit par l'adjoint de POLAIR3D. Les observations assimilées par la méthode sont constituées de mesures synthétiques, parfaites ou bruitées. Une série d'expériences se focalisant sur des sensibilités de la méthode est menée et leur qualité évaluée à l'aide d'un indicateur objectif. Un algorithme de réduction des sites suspectés pour des applications opérationnelles est testé. Finalement, les résultats de l'inversion du profil temporel de la source de l'accident d'Algésiras sont présentés.

Abstract

Atmospheric dispersion models are used to forecast consequences of accidental releases of radioactivity. Models are based on either analytical, as in the case of PX 0.1, or numerical, as for example in POLAIR3D, solutions to the advection-diffusion equation. Main drawbacks affecting the quality of a forecast are a limited resolution of input meteorological fields and an incomplete knowledge of depletion processes. An investigation of how those drawbacks could be overcome thanks to coupling the models to measurements in data assimilation procedure is presented in this thesis.

Model-to-data comparisons have been performed in the first place. The measurements employed in a validation procedure come either from passive tracer experiments or from accidental releases of radionuclides. A wind tunnel experiment for a near-field dispersion on a scale model of Bugey nuclear power station and continental scale ETEX-I experiment as well as the accidental releases in Chernobyl and Algeciras have been studied here.

Secondly, measurements have been coupled to the models in order to improve an evaluation of consequences of accidental releases and to invert their sources, should model performance turn out to be sufficiently good. The standard variational method has been used for a near-field dispersion problem. An adjoint of PX 0.1 has been constructed with the help of an automatic differentiator, and the wind tunnel measurements have been assimilated. Capacity of finding the true source emission rate has been tackled in the first place. Next, data assimilation has been employed to accommodate the modelled and measured concentration fields. The required result has been achieved by optimising the parameters which drive the spatial distribution of a plume. Benefit from data assimilation is subject to the quantity of information contained in the measurements. Therefore, posterior analysis of the monitoring network has been carried out and the possibilities of size reduction in view of operational applications have been addressed.

At continental scale, despite working exclusively with the grid boxes containing nuclear installations, the space spanned by sources is of significantly greater dimension than the one spanned by observations. Hence, the reconstruction of source position and its emission profile is an ill-posed problem. Its regularisation has been tackled with the maximum entropy on the mean principle. New cost functions, which embody spatial and temporal confinement of an accidental source, have been built. A source-measurement link has been provided by the adjoint of POLAIR3D. The method has been tested with both perfect and noisy synthetic measurements. A series of sensitivity studies have been conducted and the quality of reconstruction assessed with an objective indicator. An algorithm meant for operational usage which allows to reduce the number of suspected sites has also been tested. Finally, the results of inversion of the temporal profile of the Algeciras accidental source have been shown.

Liste de publications

Dans des périodiques avec comité de lecture

M. Krysta, M. Bocquet, B. Sportisse et O. Isnard, “Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides : An application to wind tunnel data”, *Atmospheric Environment* **40**, 38, 7267-7279

M. Krysta et M. Bocquet, “Source reconstruction of an accidental radionuclide release at European scale”, à paraître dans *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*

D. Quélo, M. Krysta, M. Bocquet, O. Isnard, Y. Minier et B. Sportisse, “Validation of the POLYPHEMUS platform : the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases”, soumis à *Atmospheric Environment*

Dans des actes de colloque

M. Krysta, M. Bocquet, O. Isnard, J.-P. Issartel et B. Sportisse, “Data Assimilation of Radionuclides at Small and Regional Scale”, apparu dans les actes de colloque d’un NATO Advanced Research Workshop, 8-12 mai 2004, Borovetz, Bulgarie : I. Farago et al. (eds), *Advances in Air Pollution Modelling for Environmental Security*, 275-284, 2005, Springer, Pays-Bas

M. Krysta, M. Bocquet et D. Quélo, “Source reconstruction for Accidental Releases of Radionuclides”, à paraître dans les actes de colloque du NATO Advanced Research Workshop, 16-20 septembre 2005, Tabakhmela, Géorgie : A. Ebel et T. Davitashvili (eds.), *Air, Water and Soil Pollution Modelling for Risk and Impact Assessment*

Table des matières

1	État de l'art de la modélisation directe et inverse de la dispersion de radionucléides	5
1.1	Introduction	6
1.2	Rejets accidentels	8
1.2.1	Accidents graves	9
1.2.2	Autres accidents	11
1.3	Les produits de fission et leur influence sur l'organisme	11
1.3.1	Dose	13
1.4	Modélisation de dispersion de radionucléides dans l'atmosphère	13
1.4.1	Expériences de dispersion	13
1.4.2	Description du terme source	14
1.4.3	Mesures collectées	15
1.4.4	Modélisation des processus de perte	16
1.4.5	Modélisation de la dispersion	17
1.4.6	Prévision d'ensemble multi-modèle	21
1.4.7	Études probabilistes du risque	21
1.5	Assimilation de données	22
1.5.1	Synthèse des méthodes d'assimilation de données	23
1.5.2	Filtre de Kalman appliqué à la dispersion des radionucléides	25
1.5.3	Approche variationnelle	29
1.6	Estimation des sources	30
1.6.1	Estimation variationnelle du terme source	30
1.6.2	Solutions de l'équation adjointe	31
1.6.3	Estimation du terme source à l'aide du filtre de Kalman	36
1.7	Conclusions	38
2	Les modèles utilisés. Validation	41
2.1	Modélisation de la dispersion	41
2.2	Dispersion à petite échelle - modèle à bouffées de l'IRSN/ECL	42
2.2.1	Modèle à bouffées gaussiennes	42
2.2.2	Expérience dans la soufflerie	44
2.2.3	Comparaison modèle-mesures	46
2.3	Validation du modèle régional POLAIR3D pour la dispersion de radionucléides	49
2.3.1	Processus de perte	49
2.3.2	Observables analysées	50

2.3.3	L'expérience ETEX	51
2.3.4	L'accident de Tchernobyl	54
2.3.5	Algésiras	58
2.4	Conclusions	65
3	Inversion de sources à l'échelle locale. Assimilation de mesures en soufflerie	67
3.1	Méthode variationnelle d'inversion	67
3.1.1	Fonction coût	68
3.1.2	Construction de l'adjoint	69
3.2	Résultats	69
3.2.1	Modélisation inverse de l'émission	70
3.2.2	Estimation des paramètres et validation sur les profils	70
3.2.3	Optimisation effectuée sur toutes les mesures	76
3.3	Évaluation des réseaux de mesures	81
3.3.1	Ordonnancement des stations selon l'erreur modèle	81
3.3.2	Tests croisés de la qualité des mesures	85
3.4	Conclusions	88
4	Inversion d'une source accidentelle à l'échelle continentale	91
4.1	Méthode d'inversion : maximum d'entropie	92
4.1.1	Description de la méthode	92
4.1.2	L'influence de l'information a priori	94
4.1.3	Estimateurs de sources	97
4.1.4	Modélisation d'erreurs	97
4.1.5	Lien avec l'approche 4D-Var	98
4.1.6	Score d'inversion	98
4.1.7	L'entropie relative d'une vraie source	99
4.2	Modèle adjoint	101
4.2.1	L'introduction du problème continu	102
4.2.2	Problème discret	103
4.2.3	Calcul des solutions adjointes à l'aide de la différentiation automatique	105
4.3	Reconstructions. Expériences de sensibilité	106
4.3.1	Expériences synthétiques (OSSE)	106
4.3.2	Reconstruction rapide : un outil de réponse en cas de crise	115
4.4	Des essais d'inversion sur l'accident d'Algésiras	117
4.5	Conclusions	122
5	Conclusions	125
5.1	Synthèse des travaux présentés	125
5.2	Conclusions	126
5.3	Perspectives	129
A	Simulations effectuées avec POLAIR3D	131
A.1	Schémas numériques	131
A.1.1	Schéma Direct Space Time pour l'advection	131
A.1.2	Solveur de Rosenbrock pour la diffusion	132
A.2	Indicateurs statistiques	133

A.3	Configuration de domaines de calcul pour POLAIR3D	136
A.3.1	L'expérience ETEX	136
A.3.2	Le rejet de Tchernobyl	136
A.3.3	L'incident d'Algésiras	137
A.3.4	Simulations d'accidents hypothétiques	137
B	Modélisation directe et inverse pour la soufflerie	139
B.1	Configuration des simulations pour la soufflerie	139
B.1.1	Géométrie du domaine de calcul	139
B.1.2	Valeurs de paramètres physiques	140
B.1.3	Paramétrisation de la turbulence	140
B.1.4	Coordonnées des stations de mesure	141
B.1.5	Paramètres de l'assimilation de données	141
B.2	Assimilation de données pour la soufflerie	142
B.2.1	Tangent linéaire et adjoint pour la fonction coût	142
B.2.2	Adjoint du modèle à bouffées	145
B.3	Tableaux des résultats de la modélisation inverse	150
B.3.1	Inversion et optimisation sur des réseaux de mesures	150
B.3.2	Optimisation sur toutes les mesures	151
B.3.3	L'analyse des réseaux de mesure	153
C	Le maximum d'entropie sur la moyenne	157
C.1	Passage entre la formulation primale et duale	157
C.1.1	Optimisation de \mathcal{L}	157
C.1.2	Exprimer l'entropie secondaire à l'aide de la fonction de partition $Z(\beta)$	158
C.2	Estimateurs de la source pour différentes ébauches	159
C.2.1	Source délocalisée	159
C.2.2	Source localisée	159
C.2.3	Source localisée et instantanée	160
C.3	Lien entre maximum d'entropie et 4D-Var pour un système linéaire . . .	161
C.3.1	Source	161
C.4	Entropie relative d'une vraie source	163
C.4.1	Fonctionnelle délocalisée	163
C.4.2	Fonctionnelle localisée	164
C.4.3	Fonctionnelle localisée et instantanée	166
C.5	Calcul pour la formulation adjointe continue	168
C.6	Calcul pour l'équation adjointe dans le cas discret	170
D	Liste des sigles utilisés	171

Chapitre 1

État de l'art de la modélisation directe et inverse de la dispersion de radionucléides

Les centrales nucléaires fournissent aujourd'hui 16% de la production mondiale d'électricité. En France cette contribution atteint 78% et est la plus élevée dans le monde. Mais c'est aux États-Unis que la plus grande quantité d'énergie électrique est fournie par le nucléaire, 764 milliards de kWh. Le parc électronucléaire mondial est composé (fin 2005 ¹) de 443 réacteurs qui fonctionnent et de 27 nouveaux en construction.

L'exploitation des réacteurs nucléaires n'entraîne pas d'émission de polluants ou de gaz à effet de serre (2.5 – 5.7 gC_{eq}/kWh, le niveau inférieur à celui caractérisant la biomasse et se situant au niveau de l'éolien ou l'hydraulique). Mais nous allons laisser de côté des arguments scientifiques, économiques ou politiques évoqués en faveur de l'utilisation d'énergie nucléaire. Nous ne polémiquerons pas non plus avec ses détracteurs qui s'appuient sur la nécessité de gérer le stockage des déchets nucléaires ou la possibilité de détourner le combustible nucléaire à des fins terroristes. Par contre nous allons nous concentrer sur des rejets accidentels de radionucléides dans l'atmosphère.

Bien que le fonctionnement des réacteurs observe de nombreuses règles visant la sécurité, personne ne peut garantir que des rejets accidentels de radionucléides n'aurent jamais lieu. Pour des services responsables de la sécurité des populations et de l'environnement, il est important de connaître l'impact d'un tel rejet, des contre-mesures en dépendant fortement. Dans un premier temps, cet impact est estimé au moyen de modèles de dispersion atmosphérique. L'impact à moyen et à long terme est ensuite établi en s'appuyant sur la modélisation des radionucléides dans le sol et leur infiltration de la chaîne alimentaire. Pour cela la connaissance du terme source est indispensable. Cette connaissance est facilitée dans le cas d'un rejet contrôlé par une cheminée filtrée, mais elle est plus faible dans le cas d'une exfiltration de radioactivité à travers l'enceinte de confinement ou pire encore dans le cas de la destruction de cette dernière. Dans ces circonstances on peut néanmoins disposer d'information indirecte sur la source à partir des mesures collectées sur le territoire contaminé. Le couplage entre des modèles de dispersion et de telles mesures afin d'améliorer leur performance ainsi que reconstruire de termes sources constitue l'axe central de ce travail.

¹<http://www.iaea.org/cgi-bin/db.page.pl/pris.main.htm>

1.1 Introduction

La modélisation de la dispersion atmosphérique de radionucléides revient à chercher les solutions de l'équation d'advection-diffusion :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{u}c)}_{\text{advection}} - \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c)}_{\text{diffusion}} - \lambda c = \sigma. \quad (1.1.1)$$

Un nuage radioactif se propage dans l'atmosphère suite à un rejet dont le terme source est noté $\sigma(\mathbf{x}, t)$. Dans le cadre de la dispersion de radionucléides, $c(\mathbf{x}, t)$ représente une concentration d'activité ou autrement dit activité volumique et s'exprime en $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$.

Les processus de transport et de perte sont les principaux phénomènes physiques modélisés. Le transport se résume à l'advection et à la diffusion de radionucléides. Les processus de perte, comme le lessivage et la décroissance radioactive sont représentés par λ dans l'équation (1.1.1). Le dépôt sec par contre est imposé comme une condition aux bords.

Les solutions de l'équation (1.1.1) peuvent être obtenues analytiquement ou numériquement. Dans le premier cas des hypothèses simplificatrices sont nécessaires et la solution ainsi obtenue est appelée bouffée gaussienne :

$$\chi(x, y, z, t) = \frac{q}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} s_x s_y s_z} \exp\left(-\frac{(x-x_p)^2}{2s_x^2}\right) \exp\left(-\frac{(y-y_p)^2}{2s_y^2}\right) \exp\left(-\frac{(z-z_p)^2}{2s_z^2}\right), \quad (1.1.2)$$

où le terme source $\sigma(\mathbf{x}, t) = q \cdot \delta(\mathbf{x}, t)$ et q désigne la quantité de matière relâchée ponctuellement et instantanément. Toute une classe de modèles de dispersion atmosphérique s'appuie sur bouffées gaussiennes en advectant leur centres de masse (x_p, y_p, z_p) et en faisant croître leur taille, en occurrence des écarts-types (s_x, s_y, s_z) par diffusion. Plus généralement l'équation (1.1.1) peut être résolue numériquement en utilisant des schémas numériques adéquats.

Le premier des modèles utilisés dans cette thèse, PX0.1, est un prototype d'un futur modèle opérationnel du centre de crise de l'IRSN (Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire). Ce modèle, développé conjointement par l'IRSN et l'ECL (École centrale de Lyon), est un modèle à bouffées gaussiennes destiné à décrire la dispersion en champ proche. POLAIR3D, le modèle eulérien développé au CERECA (Centre d'enseignement et de recherche en environnement atmosphérique), prendra le relais à l'échelle continentale. Dans la suite nous allons confronter ces deux modèles de dispersion aux mesures. Les mesures proviennent de vrais rejets accidentels de radionucléides ou elles ont été collectées suite aux émissions contrôlées imitant de tels événements. Cette confrontation n'est possible que si les prévisions de modèle sont comparables aux mesures. Pour cela un lien entre un champ d'activités volumiques c et une mesure μ doit être établi. En général, il s'exprime à l'aide de l'équation de mesure :

$$\mu = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \pi(\mathbf{x}, t) c(\mathbf{x}, t) + \varepsilon, \quad (1.1.3)$$

où la fonction d'échantillonnage π représente la façon de prendre la mesure et ε désigne l'erreur de mesure.

²¹Bq (becquerel) désigne une désintégration par seconde

Les résultats de la modélisation directe nous poussent à identifier les limitations actuelles de la modélisation de radionucléides. Nous allons chercher à améliorer d'avantage la performance des modèles en les couplant avec des mesures par le biais de l'assimilation de données. Nous allons nous appuyer sur la méthode variationnelle où une fonction coût du type :

$$J = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\pi}(c)\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2, \quad (1.1.4)$$

mesure la distance entre le vecteur d'observations, $\boldsymbol{\mu}$ et le vecteur de prévisions de modèle, $\boldsymbol{\pi}(c)$. L'écart entre ces vecteurs est pondéré par la matrice de covariance d'erreur d'observation, \mathbf{R} selon $\|\mathbf{X}\|_{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$. L'amélioration de la performance du modèle à bouffées passe par l'optimisation d'un certain nombre de paramètres de forçage. La solution de ce problème correspond au minimum de la fonction coût. Celui-ci est obtenu à l'aide d'algorithmes qui exigent la connaissance du gradient de J , calculé efficacement en mode adjoint.

À l'échelle continentale nous allons coupler les prévisions de POLAIR3D aux observations $\boldsymbol{\mu}$ dans le but de l'inverser les sources, $\boldsymbol{\sigma}$. La source ici ne se résume plus à la quantité de la matière rejetée q mais est un vecteur dont chaque composant correspond à une cellule du maillage couvrant le domaine spatio-temporel Ω . L'inversion n'est possible que si le lien entre la source $\boldsymbol{\sigma}$ et les mesures $\boldsymbol{\mu}$:

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1.1.5)$$

est connu. Remarquons d'abord que ce lien est linéaire et que l'opérateur de passage entre la source et les mesures, \mathbf{H} représente tout le processus de modélisation. Il s'agit donc dans un premier temps d'un passage vers des activités volumiques \mathbf{c} (équation 1.1.1) et dans un deuxième temps vers les mesures $\boldsymbol{\mu}$ (équation 1.1.3). L'opérateur \mathbf{H} peut être calculé efficacement en s'appuyant sur les solutions de l'équation adjointe obtenue sous l'hypothèse $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$:

$$-\frac{\partial c^*}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{u} c^*) - \operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla(c^*)) - \lambda c^* = \pi. \quad (1.1.6)$$

Si l'on dispose d'une solution adjointe $c_{i,k}^*$, appelée *rétropanache* dans ces travaux, pour chacune de mesures i dans toutes les mailles du domaine k , alors l'opérateur \mathbf{H} s'exprime :

$$[\mathbf{H}]_{i,k} = c_{i,k}^*. \quad (1.1.7)$$

Les solutions adjointes permettent donc d'exploiter une autre manière de représenter les mesures :

$$\boldsymbol{\mu} = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c^*(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (1.1.8)$$

Pour retrouver la source $\boldsymbol{\sigma}$ nous allons nous appuyer sur la méthode du maximum d'entropie. Nous exploiterons un éventail de l'information régularisant ce problème mal posé dans le but de reconstruire les sources sur la base de mesures synthétiques. Si la performance du modèle s'avère suffisamment bonne, nous aborderons le problème de l'inversion d'une source en utilisant des mesures collectées suite à un accident réel.

Tous ces éléments seront introduits progressivement dans la thèse. Si nous les présentons à ce stade de manière concise c'est dans le but de définir le cadre général de

travail. D'autre part, cette introduction nous servira d'appui tout au long de la description des avancées dans le domaine de la modélisation et de l'assimilation de données pour la dispersion de radionucléides.

Cette thèse est organisée en cinq chapitres. Le premier donne le cadre et les motivations ainsi qu'une synthèse des travaux antérieurs. Dans le deuxième chapitre nous présenterons des modèles de dispersion atmosphérique utilisés dans ces études. Le chapitre 3 décrit des résultats de l'assimilation de mesures collectées dans une soufflerie pour un modèle à bouffées gaussiennes. Ensuite, dans le quatrième chapitre nous présentons une méthode d'assimilation de données reposant sur le principe du maximum d'entropie. Ses applications à l'inversion des sources accidentelles, fictives mais aussi d'une source réelle, y seront largement discutées. Finalement, des conclusions sont données dans le chapitre 5. Pour la clarté de la présentation, les descriptions des configurations des modèles ainsi que les calculs et l'explication des sigles utilisés se trouvent dans les annexes à la fin de ce document.

Nous tenons encore à faire deux remarques concernant la présentation du contenu de cette thèse. Premièrement, la volonté de rendre chacun des chapitres lisibles séparément peut occasionner des répétitions que l'on s'est efforcé de limiter. Deuxièmement, les notations habituelles en assimilation de données (comme présentée chez [Ide *et al.*, 1997]) et en dispersion atmosphérique peuvent se heurter. Une fusion totale desservirait toutefois la clarté de la présentation. Il se peut donc que le même symbole soit parfois utilisé afin de désigner des variables différentes mais sa signification est alors rappelée.

1.2 Rejets accidentels

Nous commençons par une description des accidents graves dans le monde liés à l'utilisation civile de l'énergie nucléaire. Un réacteur produisant l'électricité est caractérisé par le type et le degré d'enrichissement du combustible, le type de refroidissement et du modérateur de neutrons. Pratiquement tous les réacteurs nucléaires fournissent l'énergie thermique, à l'exception d'un petit nombre des réacteurs à neutrons rapides qui peuvent également produire du combustible nucléaire. La plupart des réacteurs aujourd'hui en fonctionnement sont du type à eau pressurisée avec l'uranium enrichi comme combustible et de l'eau légère comme à la fois liquide de refroidissement et modérateur. L'opération d'un réacteur conduit à la formation de produits de fission dans le combustible et à l'activation des matériaux de structure par des neutrons. Tous ces éléments sont hautement radioactifs. Pour les désigner on emploie le mot radionucléide qui décrit une classe d'isotopes dont des noyaux atomiques sont instables. Ces noyaux se transformeront en des noyaux stables directement ou en passant par une série d'autres noyaux instables. Les transformations se font moyennant l'émission de rayonnement nucléaire (alpha ou bêta accompagné de l'émission du rayonnement gamma) qui a des effets sanitaires nocifs.

Pour assurer le bon fonctionnement et empêcher une éventuelle fuite de radioactivité, les réacteurs modernes sont munis de systèmes de sécurité sophistiqués. Il s'agit de trois barrières de sécurité, notamment : le gaine du combustible (pastilles, crayons), le caisson du réacteur et enfin l'enceinte de confinement.

Un accident grave est en général dû, directement ou indirectement, à un excès de chaleur accumulée par le cœur du réacteur. Si on a à faire à un tel accident accompagné par la fusion du cœur d'un réacteur, ceci implique, selon toute vraisemblance,

que les deux premières barrières ont été franchies. Mais la troisième a des chances de se maintenir. Ces chances sont estimées par des études probabilistes et se placent au niveau de 60 – 80% pour un réacteur à eau pressurisée et autour de 25% pour un réacteur à eau bouillante [De Boeck, 1997]. Si la troisième barrière préserve son intégralité, l'impact environnemental est limité. Une comparaison des conséquences de l'accident à Three Mile Island et Tchernobyl (pp. 10-11) en est un exemple frappant. L'intégralité du confinement sous-entend non seulement la préservation de la construction mais également son imperméabilité. Même si le confinement faillit à préserver son intégralité, le moment quand ceci a lieu est très important. Le plus longtemps il empêche la fuite des radionucléides, le plus long est la marge laissée pour enlever les radionucléides de l'atmosphère du confinement ce qui limite des dégâts environnementaux. Soulignons enfin que d'autres accidents, omettant l'enceinte de confinement, sont possibles. Il s'agit notamment des accidents de perte de la substance refroidissante ou de la rupture dans un générateur de vapeur.

L'idée des barrières de sécurité s'applique en théorie aussi bien aux centrales anciennement soviétiques qu'aux autres dans le monde, l'exception étant le manque fréquent de l'enceinte de confinement dont nous venons de souligner l'importance. Les centrales soviétiques sont principalement de deux types : à eau pressurisée (VVER) et à eau bouillante, du type canaux, modéré par le graphite (RBMK). Les deux premières générations des centrales à eau pressurisée, VVER-440 Modèle V230 et VVER-440 Modèle V213 ne possèdent pas l'enceinte de confinement. La troisième, VVER-1000, en est muni, [Nuclear Energy Institut, 1997]. En ce qui concerne les réacteurs du type RBMK, tous sont une source d'anxiété qui monte avec l'ancienneté du design, d'autant plus que c'est ce type de réacteur qui fonctionnait à Tchernobyl et que son emballement dans cette catastrophe était lié à une erreur de conception. Depuis la chute de l'empire soviétique des réacteurs de ce type ferment successivement sous la pression, mais également grâce à l'aide financière de la communauté internationale. Fin 2005 il y en avait encore une dizaine en fonction en Russie et un en Lituanie.

Pour classifier les accidents survenant dans des installations nucléaires, l'échelle d'INES³ (International Nuclear Event Scale) a été proposée conjointement par l'AIEA (Agence internationale de l'énergie atomique) et l'AEN (Agence pour l'énergie nucléaire) de l'OCDE (Organisation de coopération et de développement économiques). Les événements qui n'ont aucune importance vis à vis de la sécurité se placent en dehors de l'échelle. Viennent ensuite des événements qui n'ont pas d'impact sur la sécurité, autrement dit déviations, associés au niveau zéro et donc au-dessous de l'échelle. On se réfère aux *incidents* en employant les chiffres 1 – 3 et on attache aux *accidents* les niveaux 4 à 7. Les événements d'intérêt public sont ceux qui sont accompagnés des rejets des radionucléides à l'extérieur du site, donc ceux qui se situent aux niveaux 3 – 7.

1.2.1 Accidents graves

Il y avait dans le passé des accidents accompagnés de rejets de radioactivité dans l'atmosphère. Les 3 accidents les plus graves liés au fonctionnement des réacteurs nucléaires ont eu lieu à Windscale (aujourd'hui Sellafield, Royaume-Uni), Three Mile Island (États-Unis) et Tchernobyl (aujourd'hui Ukraine) à l'époque Union Soviétique.

³<http://www.iaea.org/Publications/Factsheets/English/ines-e.pdf>

Les descriptions présentées ci-dessous proviennent largement de [Cooper *et al.*, 2003] et [Chamberlain, 1991].

Windscale. Le premier de ces accidents a eu lieu entre les 7 et 12 octobre 1957 à Windscale, Cumbria au Royaume-Uni. Il est survenu dans un des deux réacteurs du site fonctionnant avec l'uranium naturel, refroidis par l'air passant à l'intérieur et modérés par le graphite. Ce dernier accumule de l'énergie de Wigner en se déformant au cours du fonctionnement du réacteur. Dans le but d'empêcher la libération spontanée de l'énergie accumulée, ce qui avait déjà eu lieu à Windscale en 1952, ses évacuations contrôlées étaient effectuées systématiquement. L'évacuation contrôlée se faisait en augmentant la chaleur du cœur qui intervenait lorsqu'on diminuait le flux d'air refroidissant. En 1957 une de ces opérations a mal tourné conduisant à la surchauffe du cœur. En conséquence, le graphite et l'uranium ont pris feu. Le problème n'a pas été détecté et le retour de la circulation d'air a aggravé la situation. En effet, l'air passant par le réacteur a soutenu le feu et emmené avec lui des produits de fission à l'extérieur. Bien que les filtres aient été efficaces pour contenir la matière en forme des particules, des produits volatiles de fission ont été rejetés dans l'atmosphère. Il y avait 12 000 TBq⁴ de ¹³³Xe, 740 TBq de ¹³¹I, 440 TBq de ¹³²Te ainsi que d'autres radionucléides en plus petites quantités. Les radionucléides les plus concernés du point de vue d'impact sanitaire était ¹³¹I qui avec ²¹⁰Po a contribué le plus à la dose reçue par la population. L'accident se classe au niveau 5 sur l'échelle internationale des événements nucléaires, INES.

Three Mile Island. Le plus grave accident du nucléaire civil américaine est survenu à Three Mile Island, en Pennsylvanie. Il s'agissait d'une des deux unités sur le site, un réacteur à eau pressurisée pratiquement nouveau au moment des faits, fin mars 1979. Un enchaînement de problèmes techniques et d'erreurs humaines a conduit à la fuite de l'eau de refroidissement du circuit secondaire et par conséquent à la fusion partielle du cœur. Deux facteurs ont limité la taille du rejet radioactif. Premièrement, la quantité de produits de fission n'était pas élevée à cause de la courte période du fonctionnement du réacteur. Deuxièmement et beaucoup plus important, le confinement de la centrale a été intact et a donc pu retenir une bonne partie des radionucléides. Néanmoins un rejet mesurable des gaz nobles, xénon en l'occurrence, et des traces d'iode, de césium et de strontium (beaucoup moins abondants que dans le rejet à Windscale) ont été enregistrés à proximité du site. L'accident à Three Mile Island a été classé au niveau 5 de l'échelle INES.

Tchernobyl. C'était une expérience effectuée sur un des 4 réacteurs fonctionnant sur le site de Tchernobyl qui a conduit à l'accident nucléaire le plus marquant dans l'histoire. Le but de l'expérience était de mesurer l'écart entre l'arrêt du réacteur et l'arrêt de la production d'électricité. Il a été convenu de la conduire en puissance réduite qui, initialement, s'est avérée trop basse. Pour l'augmenter, des crayons de graphite ont été retirés du cœur de réacteur, sans effet attendu. Ensuite, toujours dans le but de relever la puissance, le niveau de l'eau refroidissante a été baissé. Le réacteur RBMK s'est retrouvé dans un régime instable. En effet, la baisse du niveau de l'eau a diminué le nombre de neutrons absorbés et par conséquent augmenté sa puissance et par la suite sa température. Une partie de l'eau s'est transformée en vapeur, ce qui a réduit

⁴T=10¹²

ses capacités absorbantes. La puissance du réacteur a continué de monter et davantage d'eau a été vaporisée. La forte température a déformé les crayons du graphite et leur réinsertion s'est avérée impossible. Deux explosions de la vapeur d'eau ont eu lieu par la suite, le 25 avril 1986 à 2123 UTC. Le couvercle du réacteur a été expulsé et des morceaux du combustible ont été éjectés dans l'atmosphère. Leur libération a été facilitée par le manque de confinement mais, selon toute vraisemblance, l'enceinte n'aurait pas résisté à l'explosion. En plus le graphite s'est embrasé et a brûlé pendant 10 jours. La chaleur générée par le feu a été responsable de la montée des radionucléides très haut dans l'atmosphère. On estime que la totalité des gaz nobles s'est enfuie, quelques 20 à 60% des radionucléides volatiles mais seulement 3 – 4% du cœur du réacteur, [Cooper *et al.*, 2003].

L'accident à Tchernobyl, en raison de sa gravité, se classe au niveau 7, maximal, de l'échelle INES.

1.2.2 Autres accidents

Nous relatons encore deux accidents qui ne sont pas directement liés au fonctionnement des réacteurs nucléaires. Le premier est l'évènement le plus récent parmi des évènements graves et le deuxième est à la base d'une partie des études présentées dans la thèse.

Tokaimura. Cet accident est intervenu dans une usine de production du combustible nucléaire. Classé provisoirement au niveau 4, il est l'évènement le plus grave qu'ait connu une installation nucléaire japonaise. Lors de la manipulation d'uranium hautement enrichi à destination d'un réacteur à neutrons rapides, la masse critique du combustible a été dépassée. La criticalité a été atteinte et maintenue intermittente pendant 20 heures. Le processus a été facilité par la présence de l'eau qui a servi à ralentir et réfléchir des neutrons, augmentant, par conséquent, les chances de fission du combustible. Des filtres ont été efficaces pour contenir des radionucléides mais la présence de ^{131}I a été enregistrée à l'extérieur. Néanmoins, il s'agit d'un accident d'irradiation et non pas de contamination.

Algésiras. Fin mai, début juin 1998 des stations de surveillance dans plusieurs pays européens ont détecté des niveaux élevés de la radioactivité dans l'atmosphère, avec les plus grandes valeurs enregistrées dans le sud de la France et dans le nord de l'Italie. Plus tard il a été établi que les mesures avaient pour cause un rejet d'une fonderie d'acier au sud de l'Espagne. Un fourneau de la compagnie Acerinox localisé entre Algésiras et Gibraltar a fondu une source radiologique du ^{137}Cs . Le rejet a été qualifié comme incident par l'AIEA.

1.3 Les produits de fission et leur influence sur l'organisme

En général, les formes physico-chimiques des radionucléides éjectés suite à un accident nucléaires sont très variables. Les matériaux rejetés sont composés de gaz et d'aérosol, en particulier de morceaux fins du combustible. Le caractère précis et la composition du rejet varie selon la nature d'accident et le type de centrale. Pour donner

un exemple en se référant à l'accident de Tchernobyl, sa longue durée accompagnée de l'émission des éléments du combustible a été due à l'embrasement du graphite. L'analyse de la matière déposée sur des filtres indique que pratiquement la totalité du césium a été dispersée sous forme particulaire, [Clark et Smith, 1988], [Dubois et Bossew, 2003], et que 25 – 50% de l'iode était également dans cet état, le reste sous forme de vapeur.

Il se peut que les proportions entre des substances rejetées varient d'un cas à l'autre mais parmi les radionucléides rejetés dominent les produits de fission. Les gaz nobles, xénon et argon, surtout l'isotope ^{133}Xe qui représente la plus grande fraction de la radioactivité rejetée pour l'accident de Tchernobyl, [UNSCEAR, 2000, NEA, 2003], sont relâchés dans des quantités importantes. D'autres produits volatiles de fission qui donc s'échappent facilement sont l'iode, le tellure et le césium, [Abbey et Schikarski, 1988]. Plusieurs isotopes de ces éléments sont produits dans la fission nucléaire. Leurs propriétés chimiques étant définies par la structure de la couche des électrons dans un atome qui pour des isotopes du même élément est pratiquement identique, ne diffèrent pas d'un isotope à l'autre. Les différences étant liées à la composition de leur noyaux atomiques concernent les temps de demi-vie, les processus de désintégration, l'énergie du rayonnement émis et donc l'impact sur des organismes vivants. Parmi les isotopes représentant la plus grande partie de radioactivité dans le contenu du rejet de Tchernobyl [UNSCEAR, 2000, NEA, 2003] se trouvent à côté du ^{133}Xe : ^{131}I , ^{132}Te , ^{235}Np ⁵, ^{140}Ba , ^{95}Zr , ^{141}Ce , ^{103}Ru et ^{99}Mo .

Dans un premier temps après l'accident, l'impact sur la population se fait par l'immersion dans les gaz nobles et est de courte durée. La dose reçue peut être importante à cause de la pénétration de rayons gamma dans le corps mais aussi irradiation de la peau par le rayonnement bêta. Ensuite, l'ingestion des éléments radioactifs par des êtres humains s'effectue par la consommation des légumes aux feuilles vertes. Indirectement elle se fait par le lait produit par les animaux qui ont consommé l'herbe contaminée. L'impact des radionucléides de longue vie est plus complexe et demeure significatif pendant des décennies, tant que les radionucléides sont présents dans la couche du sol occupée par des racines des plantes consommées. À long terme la prise des radionucléides dépend donc de la concentration au sol et par conséquent des processus de lessivage caractérisés par une grande variabilité spatiale et temporelle.

L'abondance de radioactivité associée à un élément rejeté ne signifie pas nécessairement sa nocivité. Par exemple la majeure partie de la radioexposition de la population suite à l'accident de Tchernobyl était due à ^{132}Te et ^{132}I dans la première phase et à $^{137,134,136}\text{Cs}$ dans la deuxième phase après l'accident⁶. En général, on considère ^{137}Cs , ^{131}I et ^{90}Sr comme les isotopes ayant l'impact le plus nocif sur les organismes et qui contribuent le plus à la dose.

Les propriétés chimiques du césium sont similaires à celles du potassium avec lequel il partage l'appartenance au premier groupe de la classification périodique des éléments. Le césium est soluble dans l'eau mais dans le sol il ne rejoint pas les eaux souterraines car il se lie facilement aux particules du sol. Assimilé par un organisme vivant, il se répartit à travers le corps en s'accumulant dans les muscles. En ce qui concerne l'iode, la route d'absorption passe souvent par le lait et l'élément se concentre dans la thyroïde, [Chamberlain, 1991]. C'est aussi du lait qui parmi les produits alimentaires serait la source principale de contamination en strontium. Le strontium est moins volatile que

⁵Nous citons ^{235}Np en quatrième place, d'après [UNSCEAR, 2000], mais l'activité lui attribuée dans [NEA, 2003] est d'un facteur 10 plus petite

⁶http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1239_web.pdf

les deux autres éléments. Il est un élément du deuxième groupe, se situant juste au-dessous du calcium et partageant ses propriétés chimiques. Comme le calcium il est facilement assimilé par le corps et s'accumule dans les os. L'inhalation ou ingestion de l'isotope ^{90}Sr est d'autant plus dangereuse que son fils, ^{90}Y , émet le rayonnement bêta hautement énergétique et dangereux pour la moelle osseuse.

1.3.1 Dose

La quantification de la nocivité radioactive doit prendre en compte le caractère physique distinct de trois types du rayonnement (alpha, bêta, gamma) qui est déterminant du type d'interaction avec la matière. D'autre part la quantification devrait également refléter le fait que, selon leur propriétés chimiques, certains radionucléides s'accumuleront plus dans un organe que dans un autre.

La quantification repose sur la notion pyramidale de trois doses proposées par une commission internationale de la protection radiologique, ICRP (International Commission on Radiological Protection). Leur description concise peut être retrouvée dans [Cooper *et al.*, 2003].

Premièrement, la *dose absorbée* est égale à l'énergie absorbée du rayonnement. Elle s'exprime en gray, $\text{Gy} = \text{J.kg}^{-1}$.

La *dose équivalente* est un indicateur non pas d'énergie mais de la nocivité biologique. La même dose absorbée, 0.1 Gy par exemple, a des effets plus graves s'il s'agit du rayonnement alpha que pour le rayonnement bêta ou gamma. Pour cela tous les types du rayonnement sont pondérés. Le facteur de pondération vaut 20 pour le rayonnement alpha et 1 pour bêta et gamma, [Cooper *et al.*, 2003]. L'unité de la dose équivalente est le sievert, Sv.

La même dose équivalente peut avoir des effets différents selon l'organe affecté. Ainsi, peu importe le type de rayonnement, la dose équivalente de 1 mSv augmentera de la même manière le risque du cancer d'un organe irradié. Mais ses effets seront différents pour d'autres organes. Pour prendre en compte cette dépendance on introduit la quantité appelée *dose effective*. C'est une somme des doses équivalentes reçues par des organes différents dont les termes sont pondérés selon la sensibilité de ces organes. La pondération est faite à l'aide des coefficients de somme 1 répartis parmi les organes selon des recommandations de l'ICRP.

1.4 Modélisation de dispersion de radionucléides dans l'atmosphère

Pratiquement tous les modèles de chimie transport ont été utilisés pour décrire la dispersion de radionucléides dans l'atmosphère. Bien qu'abordé par de nombreux modélisateurs, le problème demeure difficile. Le manque de données expérimentales se traduit par des difficultés de validation et une importante erreur modèle.

1.4.1 Expériences de dispersion

La modélisation de la dispersion atmosphérique de radionucléides date de l'époque de l'accident de Tchernobyl. Suite à cet accident, la Commission européenne, l'AIEA et l'OMM (Organisation météorologique mondiale) ont lancé une étude de validation des

modèles de dispersion à l'échelle continentale. L'étude ATMES (Atmospheric Transport Model Evaluation Study), [Klug *et al.*, 1992], a été effectuée sur des données rassemblées après l'accident. Ensuite, deux expériences grande échelle, ETEX - I et II ⁷, ont débuté le 23 octobre et 14 novembre 1994 respectivement, [Nodop, 1997], [Atmospheric Environment, 1998]. Les participants à l'exercice ont été notifiés de la localisation et du débit de la source du traceur (un perfluorocarbone) dispersé. Leur tâche était de fournir des prévisions de l'évolution du nuage en temps réel. Plus tard, ATMES II ⁸ s'est focalisée sur la qualité de modélisation du nuage d'ETEX-I. En imposant l'utilisation de champs météorologiques identiques, la comparaison directe des performances des modèles participant au projet a été rendue possible.

1.4.2 Description du terme source

La première information à mettre dans un modèle décrivant des conséquences accidentelles est le terme source. Dans la section 1.2 nous avons exposé une série de barrières ayant pour but d'empêcher le rejet de radioactivité dans l'atmosphère. Vu tous les efforts entrepris dans ce sens, le lecteur est bien conscient que l'accident grave survenant dans une centrale nucléaire est un événement rare. Si un rejet de quantités importantes de radionucléides a lieu, il s'agit d'un événement accidentel extrême. Mais si c'est le cas, l'accident n'a même pas besoin d'être inattendu ou violent (l'exfiltration à travers l'enceinte de confinement quelque jours après l'accident en est un exemple) pour que la quantité de la matière rejetée soit difficile, voire impossible à mesurer. Ceci est d'autant plus vrai pour un accident violent du type Tchernobyl où l'explosion est survenue suite au dysfonctionnement de la centrale. C'est elle qui a été la cause de la fragmentation mécanique qui a donné lieu à l'émission de grandes quantités de radionucléides volatiles.

Juste après la catastrophe le terme source de l'accident de Tchernobyl était inconnu. Historiquement l'estimation de la source a été faite d'abord à la base de l'analyse de la matière déposée au voisinage de la centrale. Les estimations initiales des scientifiques soviétiques rapportées en 1986 ont été ensuite raffinées grâce à la prise en compte du dépôt non seulement sur le territoire soviétique mais partout dans le monde. D'autres études ont été menées en examinant les matériaux déposés dans le bâtiment réacteur. Les plus récentes estimations des quantités de la radioactivité rejetées peuvent être retrouvées dans [NEA, 2003]. Pour les besoins de la dispersion du nuage radioactif suite au rejet de Tchernobyl, elles seront rappelées pour des éléments volatils dans le chapitre 2.

Un rejet important de radioactivité peut contenir tous les radionucléides du cœur. Parmi eux on retrouvera à la fois des produits de fission, des actinides du combustible ou des actinides activés au cours du fonctionnement de réacteur. Pour estimer l'impact environnemental d'un rejet au voisinage de la source tous ces éléments devraient être modélisés. Des actinides ayant une température de fusion élevée condenseront rapidement et le nuage radioactif qui s'éloigne de la source contiendra surtout des radionucléides volatiles. Ces derniers seront importants à prendre en compte pour la modélisation à l'échelle continentale.

Le terme source est par contre très bien connu pour les deux expériences ETEX. Le rejet d'ETEX-I a commencé le 23 octobre 1994 à 1600 UTC (Coordinated Universal Time) et s'est terminé le 24 octobre à 0350 UTC. Le débit moyen du rejet était 7.98 g.s^{-1}

⁷<http://rem.jrc.cec.eu.int/etex/index.html>

⁸<http://rem.jrc.cec.eu.int/atmes2/index.html>

et au total 340 kg de perfluorométhylcyclohexane (PMCH) ont été rejetés.

Le rejet de perfluorométhylcyclopentane (PMCP) a eu lieu entre le 14 novembre 1994, 1500 UTC et 15 novembre 1994, 0245 UTC. La masse du PMCP rejeté vaut 490 kg avec le débit moyen 11.58 g.s^{-1} . Cette source est celle d'ETEX-II.

1.4.3 Mesures collectées

Le test de la performance du modèle consiste en sa comparaison aux mesures. Des concentrations d'activité dans l'air permettent une telle validation. Pour les expériences ETEX 168 stations de mesures prenaient des concentrations moyennes sur 3 heures pendant 96 heures après le rejet. Dans la première campagne de mesures 4032 échantillons ont été rassemblés dont 969 avec des valeurs significativement plus grandes que la valeur de fond. ETEX-II a fourni 476 concentrations non nulles.

Pour les radionucléides, les modélisateurs disposent non seulement des concentrations prenant forme d'activités volumiques mais également de données du dépôt au sol. Il s'agit de données d'autant plus importantes que la matière déposée au sol est déterminante pour l'impact environnemental à long terme. C'est la précipitation qui est un facteur déterminant de la forme des cartes de dépôt au sol. C'est également son manque au voisinage de la centrale du Tchernobyl qui explique que les régions lointaines ont été atteintes par des radionucléides volatiles comme ^{131}I , ^{132}Te et ^{137}Cs .

La possibilité de se servir des mesures de dépôt du césium nécessite de discriminer d'abord entre son niveau avant la catastrophe et la contribution du rejet de Tchernobyl, [ApSimon *et al.*, 1989]. Ceci n'est pas nécessaire en Europe de l'Est où la contribution de rejet de Tchernobyl dépasse 1000 fois la quantité de fond, [Dubois et Bossew, 2003]. Mais les résidus n'étaient pas négligeables pour l'Europe centrale et occidentale. À l'époque le niveau du césium ^{134}Cs provenant des essais nucléaires dans l'atmosphère (années 50 - 70) était faible, et donc toute la quantité mesurée de cet isotope a été attribuée au rejet du Tchernobyl. Sachant que ce dernier a été caractérisé par le rapport des quantités du ^{134}Cs et ^{137}Cs de 1 à 2, la contribution de Tchernobyl à la totalité du ^{137}Cs a pu être retrouvée. La proportion de deux isotopes du césium, à côté de la présence des isotopes de l'iode à courte vie, étaient, par ailleurs, un indicateur que le nuage provenait plutôt d'un réacteur que d'une explosion nucléaire. Une information de ce type s'avère très utile dans le processus d'inversion d'une source parce qu'elle permet de restreindre le nombre de sites suspectés.

La complexité des formes de la contamination radioactive au sol est évoquée dans [Dubois et Bossew, 2003] et son caractère fractal dans [Kanevsky *et al.*, 1997]. Leur grande variabilité à courtes distances est liée à la complexité des processus qui affectent le transport des radionucléides : leurs formes physico-chimiques, conditions météorologiques, surtout des phénomènes turbulents, appauvrissement, orographie ou le type de sol et, plus tard, migration en son sein. C'est avant tout le lien précipitation-dépôt qui est évoqué comme déterminant dans [Clark et Smith, 1988] et selon nos connaissances par la suite par tous les modélisateurs. Cette conclusion a été tirée en comparant le rapport entre les quantités du ^{131}I et ^{137}Cs déposées pour des régions affectées et pas affectées par la pluie au Royaume-Uni. Ce ratio va de 20 pour les régions où il n'a pas plu jusqu'à 2, qui est en même temps le rapport entre les quantités de deux isotopes dans l'atmosphère, pour les endroits affectés par des fortes précipitations. L'influence du dépôt sec n'est donc visible que dans le premier cas. L'estimation de sa vitesse a été obtenue dans [Clark et Smith, 1988] en prenant le rapport entre la densité de la matière

déposée et les concentrations intégrées dans l'air. Les valeurs de 0.3 cm.s^{-1} pour ^{131}I et 0.05 cm.s^{-1} pour ^{137}Cs ont été ainsi obtenues.

Des techniques différentes sont appliquées dans le but de construire des cartes du dépôt à la base des mesures distribuées discrètement en espace. Il s'agit d'une part d'interpolation où une formule déterministe est utilisée pour modéliser la distribution spatiale. D'autre part ces techniques peuvent avoir un caractère statistique et considérer les données comme une réalisation d'une variable aléatoire. L'analyse de données est fortement influencée par la densité du réseau de mesures. La détection des motifs fins dans les formes déposées requiert que le réseau de mesures possède une résolution suffisante, non seulement spatiale mais aussi dimensionnelle. Pour déterminer une dimension fractale du réseau on prend des cercles du rayon R autour de chaque station composant le réseau. On compte le nombre de stations dans chaque cercle et on cherche la valeur moyenne $n(R)$ de ces nombres. En établissant la relation $n(R) \sim R^{D_f}$ on accède à la dimension fractale D_f . Si la dimension d'un phénomène est plus petite que l'écart entre la dimension euclidienne et fractale du réseau, ce phénomène ne peut pas être détecté et par conséquent représenté, [Dubois et Bossew, 2003].

Les niveaux de contamination du sol ont été rassemblés dans une banque de données, [De Cort *et al.*, 1998]. Les cartes y présentées sont dessinées à la base de mesures rassemblées en analysant des échantillons du sol. L'analyse de la distribution spatiale concerne surtout le ^{137}Cs mais aussi le ^{90}Sr . Pour ce deuxième élément le réseau est de moindre densité mais raffiné par la distribution du premier élément grâce au ratio $\frac{^{90}\text{Sr}}{^{137}\text{Cs}}$ connu.

Depuis 1991, un réseau Téléray⁹ de surveillance permanente de niveau de la radioactivité dans l'atmosphère se développait progressivement en France. Une sonde placée dans une station de mesure enregistre le débit de dose de rayonnement gamma dans l'intervalle $[10 \text{ nGray.h}^{-1}, 10 \text{ Gray.h}^{-1}]$. Les mesures collectées sont retransmises ensuite à un système de traitement de données qui fournit une carte de la radioactivité. Des réseaux similaires existent dans plusieurs pays européens, en Afrique du Nord et sur le continent américain.

1.4.4 Modélisation des processus de perte

La modélisation de la dispersion des radionucléides qui sont des traceurs déposants requiert la prise en compte de processus d'appauvrissement. Le dépôt sec est une conséquence de l'interaction directe entre la surface de la terre et le nuage contaminé. Il est très important pour les radionucléides dans l'état gazeux, [Clark et Smith, 1988]. Le facteur principal d'élimination des radionucléides en forme d'aérosols est le phénomène d'interaction entre la pluie et le panache.

Un large spectre de schémas décrivant ces deux processus est utilisé par des modélisateurs. Une série de modèles est décrite dans [Baklanov, 1999] et a été également rassemblée dans [Sportisse, 2005]. Pour le dépôt sec il s'agit de modèles reposant sur la notion de vitesse de dépôt constante ou variable. Dans ce deuxième cas elle provient de l'approche développée à l'aide du modèle des résistances. Pour des particules de taille importante, à partir de quelques μm , la sédimentation gravitationnelle joue un rôle important à côté du dépôt sec. Le dépôt humide est décrit par la loi exprimant le débit d'appauvrissement proportionnel à la concentration volumique des radionucléides : $\frac{dc}{dt} = -\lambda_{\text{lessiv}} c$. Le coefficient λ_{lessiv} est calculé par des modèles différents selon qu'il

⁹<http://teleray.irsn.org/irsn/html/irsn/mesure/france.htm>

s'agit d'un phénomène sous le nuage (gouttes de pluie, flocons de neige), au sein des nuages ou au sein du brouillard.

1.4.5 Modélisation de la dispersion

Nous allons présenter maintenant une suite de tentatives de modélisation de l'accident de Tchernobyl. Il s'agit d'un problème difficile qui, en simplifiant, consiste à modéliser le passage du terme source mal connu vers les cartes de dépôt d'une structure riche et complexe. Le manque de connaissance du terme source s'ajoute à l'erreur modèle et les erreurs d'autres paramètres d'entrée. Tout cela rend la simulation dans le mode de prévision d'autant plus difficile. Notons, néanmoins, que depuis une dizaine d'années, l'expérience ETEX bien documentée a ouvert une possibilité de valider les modèles sur les traceurs passifs. Les modèles validés de cette manière ont pu ensuite plus facilement aborder l'accident de Tchernobyl.

Parmi les toutes premières simulations que nous avons pu identifier suite à l'accident de Tchernobyl se trouvent [ApSimon et Wilson, 1986], [Gudiksen et Lange, 1986] et [Pudykiewicz, 1989a]. Dans cette section nous en donnons quelques exemples pour illustrer des modèles différents sachant qu'ils évoluent et s'appuient sur le terme source de mieux en mieux connu.

Un exemple de modèle lagrangien

Une des premières simulations de la dispersion de radionucléides suite à l'accident de Tchernobyl est rapportée dans [ApSimon *et al.*, 1989]. Trois espèces, ^{103}Ru , ^{137}Cs et ^{131}I , ont été suivies par un modèle lagrangien à bouffées, MESOS. Cette publication très complète couvre l'éventail de problèmes, en partant des causes du rejet et allant jusqu'à discuter des normes de radioactivité imposées aux produits alimentaires à la suite de l'accident. Parmi les difficultés rencontrées au stade de la modélisation, la mauvaise connaissance du terme source est soulignée. L'extrapolation de l'intervalle du temps typiquement couvert par MESOS, 3 – 4 jours, à la période de 10 – 12 a nécessité une réduction de la taille trop importante de bouffées.

Le domaine spatiale pris en compte dans les simulations couvre l'Europe mais l'accent est mis sur le territoire britannique pour lequel les auteurs disposent des données précises sur la précipitation avec une résolution de 5 km et 15 min. Ainsi, il a été constaté que le territoire britannique a été atteint par la matière émise tôt le matin le 26 avril à Tchernobyl. Dans la plupart des cas, le temps d'arrivée du nuage s'accorde à un jour près avec les mesures. Des cartes de la concentration du ^{137}Cs dans l'air moyennée sur 24 heures sont également montrées. Des comparaisons effectuées dans quelques stations sont caractérisées par un bon accord de la variation temporelle et par une sous-estimation de mesures par un facteur de 2. Une carte du dépôt cumulé est présentée; le fait d'obtenir de plus grandes valeurs en altitude est évoqué.

Modèle eulérien

D'autre part, la dispersion du nuage radioactif provenant du Tchernobyl a été également simulée avec des modèles eulériens. Un exemple d'une telle étude qui s'est appuyée sur le modèle EURAD (EUROpean Acid Deposition model) peut être retrouvé dans [Hass *et al.*, 1990]. L'étude diffère de celle par [ApSimon *et al.*, 1989] non seulement par l'emploi d'un modèle différent mais aussi par l'utilisation des champs météo-

rologiques en régime de prévision. En faisant appel aux champs fournis par le modèle météorologique MM4, l'étude a eu pour but de valider la qualité de réponse à un rejet accidentel.

La première chose constatée dans [Hass *et al.*, 1990] est le fait que les trajectoires émises à des hauteurs différentes se déplacent dans des directions très variées. La connaissance de la hauteur du rejet est donc cruciale pour obtenir de bons résultats d'une simulation. Bien que deux espèces, ^{137}Cs et ^{131}I , ont été suivies, leur comportement étant similaire, la majorité des résultats a été illustrée seulement pour la première d'entre elles. Les cartes d'activités volumiques sont présentées avec la fréquence journalière. Pour 6 stations analysées les tendances générales du profil temporel et donc aussi le temps d'arrivée du nuage correspondent bien aux mesures. Par contre leurs valeurs, surtout en Europe centrale, ont été sous-estimées.

À cause de leur importance pour évaluer l'impact environnemental, les cartes du dépôt accumulé au sol, sec et humide, ont été produites. Les vitesses du dépôt sec prises en compte coïncidaient avec celles du SO_4 . La forme au sol reflète celle du nuage radioactif. Le dépôt humide, beaucoup plus important que le dépôt sec, est modélisée par un coefficient du lessivage λ_{lessiv} qui dépend de la précipitation p_0 selon : $\lambda_{\text{lessiv}} = 5 \cdot 10^{-5} \times p_0^{0.8}$. Il est caractérisé par des nombreuses nappes suite à l'interception du nuage par des pluies locales et sa distribution spatiale s'accorde bien aux mesures.

Comme dans pratiquement toutes les autres publications concernant la dispersion des radionucléides les auteurs s'attardent sur la nécessité de modéliser correctement la précipitation et le lessivage. Spécifiquement pour un modèle eulérien le manque d'initialisation d'une source ponctuelle est évoqué comme un inconvénient et les résultats au voisinage de la centrale ne sont pas analysés à cause de l'erreur modèle importante.

Modèle eulérien hémisphérique

Les deux exemples ci-dessus, [ApSimon *et al.*, 1989] et [Hass *et al.*, 1990], de la modélisation de la dispersion du nuage radioactif provenant de Tchernobyl ont été effectués à l'échelle continentale couvrant l'Europe. Mais il ne faut pas oublier que l'accident de Tchernobyl a eu pour résultat la dispersion et ensuite le dépôt des matériaux radioactifs à travers de l'hémisphère nord. Le nuage a été donc également simulé à l'aide de modèles hémisphériques. Un exemple d'une telle étude avec un modèle 2D peut être trouvé dans [Pudykiewicz, 1989a] et sa continuation à l'aide d'un modèle 3D dans [Pudykiewicz, 1989b]. Dans le deuxième cas les mérites du passage vers le modèle tridimensionnel sont soulignés. L'incorporation du transport vertical s'est avérée nécessaire pour bien modéliser le transfert du nuage vers la côte ouest du continent américain.

Comme plus tard dans [Hass *et al.*, 1990] le transport de ^{131}I et ^{137}Cs est simulé mais seulement le premier est utilisé dans le procédé de validation. Le modèle du dépôt sec a été construit à l'aide de résistances et un modèle du lessivage s'appuyant sur l'humidité relative a été utilisé. La performance du modèle de transport couplé aux champs analysés du Centre météorologique canadien a été validée sur une sélection de stations de mesures. Pour celles localisées en Europe le profil d'activité, donc aussi le temps d'arrivée du nuage et le temps d'arrivée de son maximum, s'accorde très bien avec le modèle. Il est frappant que cet accord, il est vrai de moindre qualité, a été retrouvé pour des stations au Japon et en Amérique du Nord. D'autant plus que le transport vers le continent américain était complexe. Ont contribué aux activités observées, une

partie du nuage qui a traversé l'Atlantique, une autre qui est descendue des régions polaires et encore une autre partie qui est arrivée du côté Pacifique. Par conséquent la montée de radioactivité a été observée en même temps dans des stations différentes.

Des analyses statistiques de l'accord entre le modèle et les mesures sont également rapportées. Des rapports modèle-mesure ont été calculés pour des activités moyennes et des activités maximales et ils varient dans l'intervalle [0.21;2.80] dans le premier cas et [0.32;3.22] dans le deuxième avec le rapport moyen près de 1 pour les deux cas. Les coefficients de corrélation pour des stations sélectionnées dans cette étude changent entre 0.24 et 0.94 et atteignent la moyenne de 0.68. Elle est nettement plus élevée, 0.88, si les logarithmes de concentrations sont considérés. Finalement, il a été souligné que la source d'incertitude principale réside dans les champs météorologiques et la paramétrisation du lessivage.

Modèles couplés lagrangien-eulérien

Un couplage entre un modèle bi-dimensionnel lagrangien à bouffées méso-échelle (RIMPUFF = Risø Mesoscale PUFF Model) avec une version bi-dimensionnelle du modèle eulérien grande-échelle (DEM = Danish Eulerian Model) donnant naissance au modèle DREAM (Danish Rimpuff and Eulerian Accidental release Model) est présenté dans [Brandt, 1998]. Très naturellement, le premier de ces modèles décrit la dispersion au voisinage de la source, le deuxième prenant le relais à plus grande distance. Le modèle a été validé sur les données provenant de deux expériences ETEX ainsi que de l'accident de Tchernobyl. La performance et la sensibilité du DREAM aux champs météorologiques, paramétrisations de la hauteur de mélange ainsi qu'à la diffusion ont été analysées.

Les observables prises en compte dans [Brandt, 1998] sont de grande importance pour la population en cas d'accident. Il s'agit de concentrations intégrées (doses), du temps d'arrivée du nuage, de concentrations maximales, de leur temps d'arrivée, ainsi que de la durée du dépassement d'un seuil donné. Leur analyse est soumise aux diverses critères statistiques. La performance globale du modèle est illustrée d'abord avec des diagrammes de corrélation (scatter plot). Puis d'autres notions statistiques, plus avancées, comme le coefficient de corrélation entre deux suites de données, le biais, l'erreur quadratique moyenne normalisée, biais et écart-type fractionnel ainsi qu'un accord global entre les valeurs mesurées et modélisées (figure of merit), ont été utilisées. Les paramétrisations qui ont fonctionné le mieux pour les expériences ETEX, ont été ensuite utilisées pour des simulations de l'accident de Tchernobyl. Les données rassemblées suite à la catastrophe ont fourni la possibilité d'étudier les paramétrisations du lessivage et du dépôt sec des radionucléides.

Pour ETEX les résultats de simulations s'accordent très bien aux mesures pour le temps d'arrivée du nuage et la durée du dépassement d'un seuil. Ils sont moins bons pour les doses et les concentrations maximales mais ne s'éloignent pas de la mesure par plus qu'un facteur 2, voire 3 dans les plus mauvais cas. Par ailleurs, le modèle DREAM se place parmi les meilleurs selon les conclusions du symposium ETEX qui a eu lieu à Vienne, [Brandt, 1998]. Les résultats sont de moindre qualité pour ETEX-II avec le modèle sur-estimant les mesures. Ceci est néanmoins le cas pour tous les modèles qui ont participé à l'exercice de l'inter-comparaison de modèles, [Brandt, 1998].

La modélisation du nuage de Tchernobyl a suivi trois éléments, ^{134}Cs , ^{137}Cs et ^{131}I . Les résultats de la modélisation du nuage dans ce cas sont comparables aux résultats

pour ETEX-I. Les doses modélisées diffèrent de mesures par un facteur 2 ou au pire 3. Pour le temps d'arrivée, le temps d'arrivée du maximum et la durée du passage l'accordement avec les mesures est même meilleur. Le bémol étant mis sur les résultats du dépôt humide à cause des schémas dépendant de la pluie. Il a été conclu que l'assimilation de données décrivant la précipitation s'avère nécessaire si on souhaite un meilleur accord entre le modèle et les mesures.

Suite aux travaux présentés dans [Brandt, 1998], une comparaison de résultats pour les différents schémas d'appauvrissement peut être trouvée dans [Brandt *et al.*, 2002]. Il a été constaté qu'un couplage du schéma reposant sur les paramètres de la couche limite atmosphérique pour le dépôt sec avec le schéma utilisant l'humidité relative pour le lessivage donne des meilleurs résultats pour l'accident de Tchernobyl simulé par DREAM.

D'autres modèles ont été validés sur les données de Tchernobyl et d'ETEX. Parmi eux le modèle eulérien MATCH (Multiscale Atmospheric Transport and Chemistry Model) du SMHI (Swedish Meteorological and Hydrological Institute) a été couplé au modèle lagrangien décrivant la dispersion des sources ponctuelles. Nous le citons ici parce que plusieurs études d'assimilation de données, qui seront décrites dans les sections 1.5 et 1.6 ont été faites avec ce modèle.

La simulation de l'expérience ETEX a été basée sur des champs météorologiques HIRLAM (High Resolution Limited Area Model). La forme et le déplacement du nuage sont reproduits correctement mais les valeurs de concentrations modélisées dépassent les mesures.

La simulation de l'accident de Tchernobyl fait appel aux champs météorologiques ERA et l'étude dans [Langner *et al.*, 1998] se focalise sur le territoire suédois. Le dépôt sec est modélisé à l'aide de l'approche de la résistance, le lessivage par un modèle exprimant la proportionnalité de la matière lessivée à la précipitation. Des valeurs des paramètres incorporés au sein du modèle ont été choisies à partir des valeurs utilisées pour les sulfates.

Des concentrations surfaciques et les cartes de dépôt au sol ont été comparées aux mesures. On insiste beaucoup sur la contribution majeure du dépôt humide au dépôt total. Les auteurs en sont bien conscients puisqu'ils disposent des mesures de ce dernier effectuées par des avions et des mesures indépendantes du dépôt humide, ce qui rend la comparaison immédiate. C'est sur la côte est de la partie centrale de la Suède que les plus grandes quantités de matière se sont déposées avec des valeurs maximales dépassant 30 kBq.m^{-2} . Le modèle reflète bien les mesures sans être capable de rendre la finesse de la carte du dépôt, ni de localiser les points chauds qui dépassent 85 kBq.m^{-2} . À l'échelle du continent de fortes différences entre les cartes de dépôt obtenus sur la base des précipitations modélisées et observées ont pu être constatées.

Les auteurs mettent en avant leur capacité à produire les gradients plus importants et réalistes que ceux reproduits par d'autres modèles eulériens. Ils associent ce fait à l'initialisation du type point source. Enfin, comme tous les travaux relatifs aux radionucléides, ils soulignent l'importance de bien connaître des champs de précipitation.

Nous avons choisi de présenter ici quelques exemples se référant aux différents types de modèles qui ont servi à effectuer la simulation de la dispersion du nuage de Tchernobyl. Parmi d'autres travaux nous pouvons aussi citer les 22 modèles qui ont participé à l'exercice ATMES, [Klug *et al.*, 1992], dont le but était d'évaluer les modèles au re-

gard des mesures collectées suite à l'accident de Tchernobyl. Des simulations de rejets accidentels font constamment l'objet d'analyses comme le témoigne l'étude d'ETEX-I présentée dans [Sofiev *et al.*, 2006a].

1.4.6 Prévision d'ensemble multi-modèle

Nous espérons à ce stade de la présentation du sujet que nous avons décrit clairement les difficultés rencontrées par les modélisateurs de la dispersion des radionucléides. Des exemples décrits dans la section précédente témoignent de la diversité des modèles utilisés et d'un éventail des schémas d'appauvrissement. D'autres écarts sont dus à l'utilisation de champs météorologiques différents. Pire encore, il est difficile de désigner une approche qui serait meilleure que toutes les autres. Peut-on alors faire quelque chose si le meilleur est impossible à indiquer ?

La prévision d'ensemble multi-modèle a été proposée comme une solution possible. Cette approche consiste en une simulation parallèle exécutée par plusieurs modèles. Pour des rejets radioactifs, dans la plupart des cas fictifs, des expériences de ce type sont réalisées par le projet ENSEMBLE, [Galmarini *et al.*, 2004a, Galmarini *et al.*, 2004b]. Le terme source étant connu dans ces exercices, la prévision d'ensemble a pour but de profiter de la variété des modèles et des diverses paramétrisations employées au sein de ces modèles pour améliorer la prévision. Le défi est d'utiliser de manière correcte, justifiée et cohérente la richesse de l'information rassemblée. Pour cela les participants du projet s'appuient sur divers critères statistiques. Parmi eux, on trouve la notion de modèle médian qui revient à prendre à chaque itération et partout dans le domaine la médiane de valeurs simulées. Il permet donc d'éliminer des valeurs extrêmes sans qu'elles n'influencent le résultat final. Non seulement cette approche s'avère plus robuste que les résultats fournis par un seul modèle, mais elle donne également les meilleures comparaisons aux données réelles, ETEX-I, que n'importe lequel des modèles participant au projet. Tandis que la contribution des modèles à la médiane varie, tous coïncident avec elle à leur tour à un ou plusieurs stades d'une simulation.

1.4.7 Études probabilistes du risque

L'étude de l'évaluation du risque lié à l'émission de radionucléides est présentée dans une série de rapports de l'institut météorologique danois DMI (Danmarks Meteorologiske Institut) et publiée dans [Baklanov et Mahura, 2004]. Les questions posées concernent les sources qui seraient les plus préoccupantes pour un territoire donné. Inversement, savoir localiser les territoires ayant le plus de chance d'être affectés par un rejet sur un site désigné fait également l'objet d'étude.

L'étude du risque de la contamination radioactive s'appuie sur l'analyse des conditions météorologiques et dans un deuxième temps aborde la dispersion atmosphérique. Pour analyser des conditions météorologiques, un grand nombre de trajectoires ayant ses origines dans un site à risque est simulé. Une trajectoire représente le mouvement d'une parcelle d'air. Ces trajectoires peuvent ensuite être regroupées selon des régimes majeurs de la circulation atmosphérique. Chaque groupe (cluster) est caractérisé par une trajectoire typique. Cette approche réduit la taille du problème et permet d'accéder à l'écoulement climatologique. D'autre part, les trajectoires sont également utilisées pour construire des champs probabilistes. Ainsi le champ de l'écoulement typique peut être étudié. Le champ de transport rapide permet d'identifier les régions ayant la plus

grande probabilité d'être touchées le premier jour (zone d'impact possible) et leurs frontières (distance d'atteinte maximale). Ce champ est important pour estimer l'impact de radionucléides à courte vie. Ces analyses sont complétées par l'étude de la précipitation qui sert à estimer l'appauvrissement du nuage.

Dans un deuxième temps les études du risque se focalisent sur la simulation de la dispersion atmosphérique et du dépôt des radionucléides, [Baklanov *et al.*, 2002]. Le domaine étudié dans est le nord de l'Europe et l'Arctique. Parmi les sites à risque se trouvent des centrales nucléaires post-soviétiques : Kola (réacteur VVER-230) et Leningrad (réacteur RBMK) en Russie, Tchernobyl en Ukraine (RBMK) et Ignalina en Lituanie (RBMK), un terrain militaire et une base de sous-marins nucléaires en Russie ainsi que des centrales en Finlande, Suède, Allemagne et Royaume-Uni. Les éléments étudiés sont ceux qui en général contribuent le plus à la dose (voir section 1.3) : ^{137}Cs , ^{131}I et ^{90}Sr . Pour tout site potentiel les trajectoires sont simulées avec le modèle DERMA (Danish Emergency Response Model for Atmosphere) et la période de simulation couvre un an : octobre 2001 - novembre 2002. Des cartes de l'activité volumique dans l'air, de l'activité intégrée, des dépôts sec et humide peuvent être construites sur la base de résultats de dispersion. Ces observables peuvent être présentés comme des quantités moyennes ou cumulées, ces dernières étant importantes pour établir par exemple l'impact de rejets de routine.

En s'appuyant sur l'information fournie par les études statistiques de la circulation atmosphériques, on peut chercher les cas les plus défavorables du point de vue d'un scénario d'accident et des conditions météorologiques. Dans ces circonstances l'étude est plus détaillée, s'appuie sur un maillage plus fin et un terme source plus complexe en ce qui concerne sa composition, sa distribution temporelle et verticale. Une telle étude pour des rejets fictifs provenant de quelques sites localisés au nord de l'Europe est présentée dans [Mahura *et al.*, 2003].

Des informations supplémentaires sur des rejets, la dispersion, le dépôt et des effets biologiques de radionucléides peuvent être retrouvées dans [Magill et Galy, 2005, Cooper *et al.*, 2003, Chamberlain, 1991] ainsi que dans [Warner et Harrison, 1993] facilement accessible sur internet. Les rapports de l'AIEA et de l'AEN en sont aussi une source précieuse.

1.5 Assimilation de données

La modélisation consiste d'abord en une compréhension des processus physiques. Le but est de simplifier leur description pour qu'ils deviennent représentables à l'aide d'équations mathématiques. Par conséquent, les résultats des simulations numériques reposant sur ces équations dévient toujours du vrai état d'un système physique, et ceci sans parler des erreurs liées à la discrétisation du modèle. L'autre source d'erreur est l'inexactitude des données d'entrée. Spécifiquement, pour la modélisation des conséquences accidentelles donc en particulier pour la dispersion de radionucléides, le terme source, bien qu'indispensable, est souvent mal connu (voir section 1.4.2). Il en est de même pour certains paramètres décrivant la situation météorologique et les modèles de diffusion, lessivage ou dépôt. Une possibilité de contrebalancer les difficultés rencontrées par la modélisation est de s'appuyer sur une source d'information supplémentaire. L'information supplémentaire peut provenir des mesures effectuées au sein du système modélisé. Le procédé du couplage entre un modèle et des observations porte le nom

d'*assimilation de données*. Puisque dans la suite de la thèse nous allons étudier les opportunités offertes par cette méthode, nous consacrons cette section à une description plus détaillée des applications faites à ce jour dans le domaine de la dispersion de radio-nucléides. Il en découlera la section suivante qui se focalisera sur un aspect particulier du couplage modèle - mesures, notamment l'optimisation des sources accidentelles.

1.5.1 Synthèse des méthodes d'assimilation de données

L'assimilation de données est une technique pour estimer le vrai état du système en pondérant l'information a priori provenant d'un modèle dynamique avec celle apportée par des mesures. Elle peut prendre des formes distinctes, bien qu'équivalentes, sous certaines hypothèses. Il s'agit d'une part de l'approche *variationnelle* dont l'origine pour les problèmes météorologiques remonte à [Le Dimet et Talagrand, 1986]. D'autre part, une approche alternative fait appel aux techniques séquentielles et dans les sciences d'atmosphère c'est le *filtre de Kalman*, [Kalman, 1960], ou ses dérivés, qui sont le plus fréquemment utilisés.

Pour présenter les méthodes d'assimilation de données nous avons besoin d'introduire les notations suivantes. On désigne l'état d'un modèle à l'aide de $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^N$ et le vecteur de mesures par $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$, où le rapport entre d et N dépend du problème considéré. Le lien entre les deux vecteurs est fourni par l'opérateur d'observation \mathbf{H} selon l'équation :

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{H}\mathbf{X} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (1.5.1)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}$ est l'erreur de mesure distribuée normalement et \mathbf{R} désigne sa matrice de covariance : $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0, \mathbf{R})$. On doit également disposer d'une information a priori concernant l'état, notée \mathbf{X}^b et appelée ébauche (b=background). L'état recherché, ou l'analyse \mathbf{X}^a , est obtenu en pondérant l'information fournie par l'ébauche et les mesures.

L'approche la plus simple possédant une formulation mathématique rigoureuse est celle du meilleur estimateur linéaire sans biais ou BLUE (Best Linear Unbiased Estimator). Le fait que l'estimateur soit sans biais découle de la même hypothèse faite à la fois sur l'ébauche et les mesures utilisées pour construire l'analyse. La correction de l'ébauche se fait à l'aide d'une fonction linéaire prenant en argument à la fois l'ébauche et les mesures :

$$\mathbf{X}^a = \mathbf{X}^b + \mathbf{K}(\boldsymbol{\mu} - \mathbf{H}\mathbf{X}^b). \quad (1.5.2)$$

L'estimateur est le meilleur au sens du minimum de la variance de \mathbf{X}^a autour du vrai état du système \mathbf{X}^t , donc de minimum de la trace de la matrice de covariance d'erreur d'analyse :

$$\mathbf{P}^a = \text{Cov}\{\mathbf{X}^a - \mathbf{X}^t, \mathbf{X}^a - \mathbf{X}^t\}$$

par rapport à l'inconnu \mathbf{K} qui intervient dans la formule (1.5.2). La minimisation permet d'établir la matrice de gain qui s'écrit :

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}^b \mathbf{H}^T (\mathbf{H} \mathbf{P}^b \mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-1}, \quad (1.5.3)$$

et qui est une fonction de la matrice de covariance d'erreur d'ébauche définie par :

$$\mathbf{P}^b = \text{Cov}\{\mathbf{X}^b - \mathbf{X}^t, \mathbf{X}^b - \mathbf{X}^t\}.$$

Bien que simple, cette approche est importante parce que l'interpolation optimale et le filtre de Kalman dans leur étape d'analyse s'appuient sur BLUE.

Imaginons un système dont l'évolution est décrite par le modèle \mathbf{M}_n :

$$\mathbf{X}_n = \mathbf{M}_{n-1}\mathbf{X}_{n-1} + \boldsymbol{\eta}_n, \quad (1.5.4)$$

avec l'erreur modèle distribuée normalement : $\boldsymbol{\eta}_n \sim N(0, \mathbf{Q}_n)$, où \mathbf{Q}_n et sa matrice de covariance, tous étant indexés par le temps n . Dans ce cas l'analyse peut être effectuée au fur et à mesure que les observations deviennent disponibles. Une compatibilité entre le modèle et les mesures est assurée par l'opérateur d'observation \mathbf{H}_n , de manière analogue à celle donnée par l'équation (1.5.1) :

$$\boldsymbol{\mu}_n = \mathbf{H}_n\mathbf{X}_n + \boldsymbol{\varepsilon}_n, \quad (1.5.5)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}_n \sim N(0, \mathbf{R}_n)$. L'analyse à l'instant donné \mathbf{X}_{n-1}^a , ainsi que la matrice de covariance de l'erreur d'analyse \mathbf{P}_{n-1}^a , sont transportées par le modèle \mathbf{M}_{n-1} et deviennent, respectivement, l'ébauche \mathbf{X}_n^f (f=forecast) et la matrice de covariance de l'erreur d'ébauche \mathbf{P}_n^f à l'instant suivant. Par conséquent l'étape de prévision s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_n^f &= \mathbf{M}_{n-1}\mathbf{X}_{n-1}^a, \\ \mathbf{P}_n^f &= \mathbf{M}_{n-1}\mathbf{P}_{n-1}^a\mathbf{M}_{n-1}^T + \mathbf{Q}_n. \end{aligned} \quad (1.5.6)$$

L'étape d'analyse qui modifie une prévision au moment d'arrivée des observations $\boldsymbol{\mu}_n$, prend la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_n^a &= \mathbf{X}_n^f + \mathbf{K}_n(\boldsymbol{\mu}_n - \mathbf{H}_n\mathbf{X}_n^f), \\ \mathbf{P}_n^a &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n\mathbf{H}_n)\mathbf{P}_n^f, \end{aligned} \quad (1.5.7)$$

où on retrouve la matrice de gain définie par BLUE, (1.5.3) :

$$\mathbf{K}_n = \mathbf{P}_n^f\mathbf{H}_n^T(\mathbf{H}_n\mathbf{P}_n^f\mathbf{H}_n^T + \mathbf{R}_n)^{-1}. \quad (1.5.8)$$

Soulignons que le filtre de Kalman implique la linéarité du modèle de prédiction \mathbf{M}_n et de l'opérateur d'observation \mathbf{H}_n . Dans le cas où cette hypothèse tombe, l'algorithme peut toujours être utilisé après linéarisation des opérateurs. Dans ce cas il porte le nom du *filtre de Kalman étendu*.

L'approche variationnelle est globale et agit dans les limites d'un intervalle du temps considéré, $[t_0, \dots, t_{N_t}]$, sur tous les états du système et toutes les mesures y appartenant. Il se donne pour but d'estimer \mathbf{X}_{N_t} , l'état initial pour une prévision allant au delà de la période couverte par les mesures. Pour un modèle parfait, l'estimation de \mathbf{X}_{N_t} revient à estimer \mathbf{X}_0 puisque tous les états sont liés selon :

$$\mathbf{X}_n = \mathbf{M}_n(\mathbf{X}_{n-1}). \quad (1.5.9)$$

Remarquons que cette fois-ci le modèle \mathbf{M}_n et l'opérateur d'observation \mathbf{H}_n ,

$$\boldsymbol{\mu}_n = \mathbf{H}_n(\mathbf{X}_n) + \boldsymbol{\varepsilon}_n,$$

ne sont pas nécessairement linéaires et par conséquent ne sont plus notés en gras.

La méthode variationnelle fait appel à une quantité évaluant la distance entre les mesures et le modèle. L'estimation de l'état du système correspond au minimum d'ainsi définie fonction coût :

$$J(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_{N_t}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{X}_0 - \mathbf{X}_0^b\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_t} \|\boldsymbol{\mu}_n - H_n(\mathbf{X}_n)\|_{\mathbf{R}_n^{-1}}^2, \quad (1.5.10)$$

où la notation $\|\mathbf{X}\|_{\mathbf{A}}^2$ signifie $\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$ et la méthode porte le nom de *4D-Var*. Le premier terme correspond à l'ébauche de l'état initial et le deuxième exprime l'écart entre les mesures et les prévisions du modèle. Remarquons, pour rapprocher cette notation de celle du filtre de Kalman ci-dessus, que $\mathbf{X}_0^b = \mathbf{X}_0^f$ et $\mathbf{B} = \mathbf{P}_0^f$.

La fonction coût décrite par la formule (1.5.10), peut être utilisée avec d'autres contraintes. En particulier, la forme prenant en compte l'erreur modèle :

$$\mathbf{X}_n = M_n(\mathbf{X}_{n-1}) + \boldsymbol{\eta}_n,$$

fait apparaître le troisième terme :

$$J^{\text{faible}}(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_{N_t}) = J(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_{N_t}) + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_t-1} \|\mathbf{X}_n - M_n(\mathbf{X}_{n-1})\|_{\mathbf{Q}_n^{-1}}^2, \quad (1.5.11)$$

et s'appelle *formulation faible*. La formulation faible a été objet d'étude et est très bien expliquée dans [Griffith, 1997] ou, de manière synthétique, dans [Nichols, 2003b].

Le minimum de J est recherché à l'aide des méthodes du gradient-conjugué ou de quasi-Newton. Le gradient de J requis par ces méthodes est calculé efficacement par le mode adjoint [Talagrand et Courtier, 1987]. Il se peut aussi que l'optimisation ne concerne pas directement l'état mais l'ensemble des paramètres du modèle, comme nous allons le présenter pour le modèle à bouffées gaussiennes dans le chapitre 3.

Si on suppose que le modèle M_n est linéaire et parfait, alors le filtre de Kalman est équivalent à la méthode variationnelle, [Zhijin et Navon, 2001]. Dans le cas où l'erreur modèle est prise en compte par le filtre (comme dans la formule (1.5.6)), l'équivalence concerne le filtre de Kalman et l'approche variationnelle faible.

Nous renvoyons le lecteur qui n'est pas familier avec l'assimilation de données vers des rapports concis et agréables à lire [Nichols, 2003a, Nichols, 2003b] et d'autres plus volumineux [Bouttier et Courtier, 1999, Todling, 1999] et [Bocquet, 2005b] disponible en langue française. En cherchant des livres consacrés à cette thématique, le lecteur peut se tourner vers [Daley, 1991] ou [Kalnay, 2002].

1.5.2 Filtre de Kalman appliqué à la dispersion des radionucléides

Nous avons décrit précédemment les exemples des simulations de la dispersion du nuage radioactif suite à l'accident de Tchernobyl. Comme le nuage était un phénomène trans-frontalier des actions plus concertées ont aussi été entreprises. Le but du projet RODOS (Realtime Online Decision Support System for Nuclear Emergency Management) était de fournir une aide à la décision en cas de crise liée à l'urgence radiologique. Ce projet a été lancé en 1989 et développé au sein du 3-ème, 4-ème et 5-ème Programme-cadre de l'Union européenne avec une contribution financière de nombreuses institutions. Il s'agit d'un système de dispersion atmosphérique à plusieurs échelles qui fonctionne en ligne et en temps réel. Il compte parmi les approches les

plus développées dans le domaine de l'assimilation de données pour la dispersion de radionucléides.

À petite échelle, le rôle du système développé autour du modèle à bouffées RIMPUFF est de prédire l'évolution du panache et ensuite, dans la phase 'post-plume', l'impact de la contamination sur la chaîne alimentaire. L'assimilation de données au voisinage de la source améliore les performances du modèle à plus longues distances. Elle permet également une réduction des incertitudes de l'estimation du vecteur d'état. Pour y arriver, un modèle statistique a été construit au-dessus du modèle de dispersion. Ce modèle considère l'activité contenue dans une bouffée comme la valeur moyenne. L'incertitude autour de cette valeur est décrite par la matrice de covariance d'erreur. À chaque instant auquel de nouvelles mesures arrivent, la matrice de covariance d'erreur est actualisée.

Dans le cadre du projet DANOEM (Data Assimilation for Off-site Nuclear Emergency Management) un module d'assimilation de données ayant la forme du filtre de Kalman a été développé pour améliorer la capacité à prévoir les trajectoires et le contenu radioactif des bouffées émises par RIMPUFF, [Puch et Astrup, 2004, Puch *et al.*, 2002, Rojas-Palma *et al.*, 2003]. Par conséquent, la détermination du champ d'irradiation par le nuage et du champ de contamination par le dépôt au sol a été améliorée. Le filtre de Kalman couplé avec RIMPUFF optimise l'inventaire de la matière radioactive emportée par chacune des bouffées, $q_p^{(i)}$, et les positions de leur centre de masse, $(x_p^{(i)}, y_p^{(i)}, z_p^{(i)})$. Il s'agit donc de 4 variables d'état par bouffée :

$$\mathbf{X}_n^{(i)} = (q_{p,n}^{(i)}, x_{p,n}^{(i)}, y_{p,n}^{(i)}, z_{p,n}^{(i)}),$$

où l'indice n parcourt le temps et i le nombre de bouffées. L'évolution des positions des centres de masse est donnée par des équations cinétiques :

$$\begin{pmatrix} x_{p,n}^{(i)} \\ y_{p,n}^{(i)} \\ z_{p,n}^{(i)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{p,n-1}^{(i)} \\ y_{p,n-1}^{(i)} \\ z_{p,n-1}^{(i)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_n^{(i)} \\ v_n^{(i)} \\ w_n^{(i)} \end{pmatrix} \cdot \Delta t. \quad (1.5.12)$$

Elles font intervenir le champ de vent (u, v, w) mais les positions des bouffées advectées changent indépendamment de leur position actuelle ou passée. La radioactivité portée par une bouffée est affectée par le dépôt sec (f_{sec}), humide (f_{lessiv}) et la décroissance radioactive (f_{radio}). Schématiquement, l'action des processus d'appauvrissement s'écrit :

$$q_{p,n}^{(i)} = q_{p,n-1}^{(i)} \cdot (f_{\text{sec}} + f_{\text{lessiv}} + f_{\text{radio}}). \quad (1.5.13)$$

Par conséquent, la matrice du modèle transformant le vecteur d'état de la i -ème bouffée est diagonale :

$$M_n^{(i)} = \begin{pmatrix} (f_{\text{sec}} + f_{\text{lessiv}} + f_{\text{radio}}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.5.14)$$

Le vecteur d'état pour l'ensemble de N bouffées s'écrit :

$$\mathbf{X}_n = (\mathbf{X}_n^{(1)}, \dots, \mathbf{X}_n^{(N)}), \quad (1.5.15)$$

et donc la matrice M_n décrivant l'évolution de l'ensemble des bouffées est aussi diagonale. Puisque le nombre de bouffées dans un domaine change, la taille du vecteur d'état

est variable. La nécessité de la gérer correctement est un défi spécifique à ce problème. Le défi diffère de celui de l'assimilation de données traditionnelle dans les sciences de l'atmosphère où l'enjeu est de réduire le vecteur d'état, [Puch *et al.*, 2002].

Le vecteur de mesures est composé, soit de concentrations dans l'air prises au niveau de la cheminée et dans les environs de la centrale, soit de débits de dose du nuage (cloud-shine) moyennés sur 10 minutes. L'apparition des positions de bouffées $(x_{p,n}, y_{p,n}, z_{p,n})$ dans le vecteur d'état, \mathbf{X}_n , fait intervenir une dépendance non-linéaire entre certaines composantes du vecteur d'état et des mesures. Cette dépendance s'exprime à l'aide du modèle à bouffées (du même type que celui décrit dans le chapitre 2, équation (2.2.5), page 44).

Après simplifications, la concentration relative d'un isotope radioactif attachée à la i -ème bouffée s'écrit :

$$\chi^{(i)}(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} s^{(i)3}} \exp\left(-\frac{r_p^{(i)2}}{2s^{(i)2}}\right), \quad (1.5.16)$$

où

$$r_p^{(i)} = [(x - x_{p,n}^{(i)})^2 + (y - y_{p,n}^{(i)})^2 + (z - z_{p,n}^{(i)})^2]^{\frac{1}{2}},$$

est la distance par rapport au centre de la bouffée et l'écart-type décrivant sa taille,

$$s^{(i)} = \left(\left(s_{h,n}^{(i)} \right)^2 s_{z,n}^{(i)} \right)^{\frac{1}{3}},$$

est construit sur la base des écarts-types représentant la taille horizontale $s_{h,n}^{(i)}$ et verticale $s_{z,n}^{(i)}$ de la bouffée. La dose $G^{(i)}(x_d, y_d, z_d, t)$ du rayonnement γ émis par cette bouffée et mesurée dans un point $\mathbf{x}_d = (x_d, y_d, z_d)$ s'exprime, en simplifiant la formule utilisée dans [Puch et Astrup, 2004], par :

$$G^{(i)}(x_d, y_d, z_d, t) \sim \int_{-\infty}^{\infty} B(r_d) \chi^{(i)}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}, \quad (1.5.17)$$

où ' \sim ' et $B(r_d)$ cachent un certain nombre de facteurs physiques et géométriques avec $r_d = [(x - x_d)^2 + (y - y_d)^2 + (z - z_d)^2]^{\frac{1}{2}}$ une distance entre le détecteur (x_d, y_d, z_d) et un point (x, y, z) au cœur du panache.

L'opérateur \mathbf{H}_n à l'instant n est obtenu par linéarisation, soit de la concentration χ , soit de la dose G en fonction de la nature des mesures constituant le vecteur d'observation. Un terme (j, i) de l'opérateur linéarisé serait par exemple :

$$\mathbf{H}_n^{j,i} = \frac{\partial \chi(x_j, y_j, z_j, t_n)}{\partial y_{p,n}^{(i)}}(\mathbf{X}_n) \quad \text{ou} \quad \mathbf{H}_n^{j,i} = \frac{\partial G(x_j, y_j, z_j, t_n)}{\partial y_{p,n}^{(i)}}(\mathbf{X}_n), \quad (1.5.18)$$

pour la j -ème mesure et pour la coordonnée $y_{p,n}^{(i)}$ de la i -ème bouffée au point défini par le vecteur d'état \mathbf{X}_n .

À cause des non linéarités, le filtre de Kalman utilisé par RODOS est en fait le filtre de Kalman étendu. Plus précisément, l'innovation $(\boldsymbol{\mu}_n - H_n(\mathbf{X}_n^f))$, formule (1.5.7), est calculée avec l'opérateur non linéaire d'observation, $H_n = \chi(t_n)$ ou $H_n = G(t_n)$. C'est seulement pour construire la matrice de gain \mathbf{K}_n , formule (1.5.8), que l'opérateur est

linéarisé. S'il s'agit de débits de dose dans le vecteur des mesures, une complication supplémentaire est liée à l'apparition d'une intégrale dans la formule (1.5.17). En pratique, un nombre élevé des intégrales doit être évalué qui est une difficulté supplémentaire à surmonter par un système qui se veut opérationnel.

L'erreur d'observation est une variable distribuée normalement avec la matrice de covariance \mathbf{R}_n diagonale à cause de l'indépendance des mesures entre elles et dont les termes sont déterminés par les paramètres techniques de détecteurs.

L'erreur modèle est supposée être distribuée normalement autour de zéro. La grande matrice de covariance \mathbf{Q}_n de l'ensemble du système à l'instant t_n est composée de blocs 4×4 :

$$\mathbf{Q}_n = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_n^{(1,1)} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{Q}_n^{(1,N)} \\ \dots & \dots & \dots & \mathbf{Q}_n^{(i',i)} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \mathbf{Q}_n^{(i,i')} & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{Q}_n^{(N,1)} & \dots & \dots & \dots & \mathbf{Q}_n^{(N,N)} \end{pmatrix}. \quad (1.5.19)$$

Les blocs sur la diagonale $\mathbf{Q}_n^{(i,i)}$ décrivent chacun une bouffée, les blocs en dehors de la diagonale déterminent les covariances d'erreur modèle pour les quantités associées aux bouffées différentes, $\mathbf{Q}_n^{(i,i')}$. Ces deux types de matrices sont presque diagonales avec seulement des covariances non-nulles aux positions x et y en dehors de la diagonale :

$$\mathbf{Q}_n^{(i,i)} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}_{Q^{(i)}}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{s}_{x^{(i)}}^2 & \mathbf{s}_{x^{(i)}y^{(i)}} & 0 \\ 0 & \mathbf{s}_{y^{(i)}x^{(i)}} & \mathbf{s}_{y^{(i)}}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{s}_{z^{(i)}}^2 \end{pmatrix}, \quad (1.5.20)$$

et

$$\mathbf{Q}_n^{(i,i')} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}_{Q^{(i)}Q^{(i')}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{s}_{x^{(i)}x^{(i')}} & \mathbf{s}_{x^{(i)}y^{(i')}} & 0 \\ 0 & \mathbf{s}_{y^{(i)}x^{(i')}} & \mathbf{s}_{y^{(i)}y^{(i')}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{s}_{z^{(i)}z^{(i')}} \end{pmatrix}. \quad (1.5.21)$$

La modélisation de la matrice de covariance d'erreur modèle revient à se poser la question de l'exactitude de données d'entrée pour les équations cinétiques (champ du vent) et des modèles de dépôt de radioactivité utilisés.

Le filtre de Kalman original utilisé par RODOS transporte toute la matrice de covariance \mathbf{P}_n^a bien que cette matrice possède beaucoup de termes non-nuls. En effet, dans RIMPUFF, les bouffées sont divisées en 5 petites bouffées lorsque leur taille dépasse un certain seuil. Les covariances prennent en compte seulement la corrélation entre les bouffées émises successivement et entre un parent et ses fils. La matrice devient de plus en plus creuse avec le temps. L'utilisation de cette information a permis de se restreindre aux distributions de probabilité qui correspondent aux blocs de la matrice de covariance et qui sont donc petites. Le problème a été réduit et le filtre de Kalman associé a pu être simplifié, [Ranyard, 1996].

D'autres possibilités de le modifier sont décrites, [Rojas-Palma *et al.*, 2003]. Il s'agit du filtre de Kalman d'ensemble qui propage non pas un seul mais plusieurs états du système. Une autre approche consiste à employer le filtre de Kalman de rang réduit où seulement les modes liés aux plus grandes valeurs propres des matrices de covariance \mathbf{P} contribuent à l'estimation. Pour des applications opérationnelles, la possibilité de remplacer, soit la matrice de covariance d'erreur, soit la matrice de gain par une matrice constante est également évoquée.

L'assimilation de données au sein du système RODOS n'est pas restreinte aux processus de dispersion atmosphérique. Comme la modélisation, elle se réfère également au dépôt, aux modules de transport hydrologique et à la chaîne alimentaire. Les mesures intervenant dans les estimations de la matière déposée consistent en des débits de dose ainsi que des concentrations de radionucléides sur les plantes. Pour des modules concernant la chaîne alimentaire, le contenu des radionucléides dans les substances alimentaires est directement mesuré. De même, pour les modèles hydrologiques, le contenu des radionucléides dans l'eau est utilisé pour améliorer les prévisions du modèle. À l'époque, [Rojas-Palma *et al.*, 2003], des tests de l'algorithme sur des données de l'accident à Tokaimura étaient envisagés.

Notons que pour la dispersion à grande échelle, RODOS fait appel à MATCH, le modèle déjà mentionné dans la section 1.4, avec la dispersion au voisinage du terme source assurée par RIMPUFF. Néanmoins, nous n'avons pas trouvé d'indication d'utilisation de l'assimilation de données à cette échelle par RODOS.

1.5.3 Approche variationnelle

Un procédé de modification d'entrées d'un modèle lagrangien régional a été proposé dans [Raes *et al.*, 1991]. Selon nos connaissances, ceci constitue le premier essai pour assimiler des mesures au sein d'un modèle de dispersion de radionucléides dans le but d'améliorer la prévision. En effet, une fonction analytique donnée par une somme de gaussiennes est proposée pour représenter les mesures. Les valeurs des paramètres qui la décrivent sont obtenues en minimisant l'écart entre les valeurs de la fonction et les prévisions du modèle. La fonction ainsi paramétrisée définit l'entrée du modèle pour le pas suivant. Cette approche ressemble à l'approche variationnelle. Mais dans [Raes *et al.*, 1991] ce sont les mesures qui sont transformées pour qu'une comparaison aux prévisions du modèle soit possible et non pas inversement, comme dans une approche variationnelle standard. Une application de la méthode à la simulation des conséquences de l'accident de Tchernobyl prouve sa faisabilité. La localisation du nuage s'améliore (de plusieurs centaines de kilomètres) et par conséquent les concentrations (d'un ordre de grandeur) par rapport à une simulation qui n'assimile pas de mesures.

Une des premières applications de l'approche variationnelle dans son intégralité à la dispersion des radionucléides a été proposée dans [Robertson et Persson, 1993]. Le 4D-Var construit selon des ingrédients exposés dans la section 1.5.1 s'appuie sur une fonction coût de la forme :

$$J = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_t} \|\boldsymbol{\mu}_n - \boldsymbol{\pi}_n(c)\|_{\mathbf{R}_n}^2. \quad (1.5.22)$$

L'algorithme a été testé sur une expérience jumelle à l'échelle européenne. Pour engendrer les mesures un terme source fictif placé en Europe centrale et émettant un gaz radioactif pendant 48 h a été utilisé. Le panache a été simulé à l'aide d'un modèle eulérien et les mesures ont été collectées dans les stations EMEP (European Monitoring and Evaluation Program). Elles ont été ensuite bruitées avec un bruit de 50%.

La localisation de la source étant supposée connue, c'est son débit ainsi que le niveau de transport des radionucléides qui ont été ajustés. Une comparaison entre le panache accidentel et les panaches ajustés au cours des itérations successives de minimisation de J est présentée. Les conclusions de [Robertson et Persson, 1993] affirment que c'est le niveau de transport qui est ajusté dans un premier temps et les modifications du débit le suivent. Il a été également remarqué que si l'état initial sur-estime le débit de la source, alors l'algorithme converge mieux que dans le cas d'une sous-estimation.

1.6 Estimation des sources

Nous allons décrire ci-après les différentes approches qui ont été entreprises dans le but de reconstruire une source de radionucléides en s'appuyant sur des mesures collectées suite à un rejet accidentel.

1.6.1 Estimation variationnelle du terme source

L'assimilation de données pour des modèles de transport à grande échelle a longtemps souffert du manque de données fiables qui avaient été rassemblées suite aux rejets contrôlés. Il fallait donc se contenter de mesures synthétiques comme ceci était le cas dans [Robertson et Persson, 1993]. Dès que les données des expériences ETEX sont devenues disponibles, l'inversion de la source du rejet a pu être abordée. En s'appuyant sur le modèle MATCH, une optimisation de la variation temporelle et de l'extension verticale du terme source a été entreprise dans [Robertson et Langner, 1997]. La positivité du débit \dot{q} a été imposée dans l'approche variationnelle en effectuant le changement de variables $\dot{q} = s^2$ et en utilisant s et non pas \dot{q} pour construire la fonction coût. La fenêtre d'assimilation a été ouverte pendant 24 h, de 1200 UTC le 23 à 1200 UTC le 24 octobre tandis que le vrai rejet avait lieu entre 1600 et 0400 UTC. Un signal fort indiquant l'émission, en accord avec le temps du vrai rejet (sauf pour les deux dernières heures), a pu être retrouvé. Le profil de la source inversée a forme d'une courbe en cloche et contraste avec le débit constant de l'expérience. Ce fait est attribué à l'assimilation de mesures moyennées. Le débit moyen de la source reconstruite vaut 4.0 g.s^{-1} et est égal à la moitié de la vraie valeur. La sous-estimation du terme source reconstruit est liée à la sur-estimation des concentrations en mode de prédiction.

Dans [Politis et Robertson, 2004], la méthode bayésienne est utilisée à côté de la méthode variationnelle pour modifier la source et par conséquent améliorer les prévisions. À chaque instant n , le nombre de composantes du vecteur source σ_n est égale au nombre de cellules du maillage. La source est considérée décrite par une distribution gaussienne :

$$\sigma_n \sim N(\bar{\sigma}_n, \mathbf{B}_n). \quad (1.6.1)$$

L'approche bayésienne consiste à modifier cette information a priori, sa moyenne $\bar{\sigma}_n$ et sa matrice de covariance \mathbf{B}_n , sachant qu'une nouvelle mesure arrive à l'instant n' . Il s'agit d'une méthode séquentielle qui a l'avantage de prendre en compte l'asynchronicité

de données suite à un accident nucléaire. L'actualisation des moments de la distribution gaussienne se fait par :

$$\mathcal{E}\{\boldsymbol{\sigma}_n | \pi_{n',i}(c) = \mu_{n',i}\} = \bar{\boldsymbol{\sigma}}'_n = \bar{\boldsymbol{\sigma}}_n + \mathbf{A}_{n',n}^i s_{n',i}^{-1} [\mu_{n',i} - \mathcal{E}\{\pi_{n',i}(c)\}] \quad (1.6.2)$$

$$\text{Var}\{\boldsymbol{\sigma}_n | \pi_{n',i}(c) = \mu_{n',i}\} = \mathbf{B}'_n = \mathbf{B}_n - \mathbf{A}_{n',n}^i s_{n',i}^{-1} (\mathbf{A}_{n',n}^i)^T, \quad (1.6.3)$$

où \mathcal{E} désigne l'espérance et $\mu_{n',i}$ la i -ème mesure à l'instant n' . La notation $\mathbf{A}_{n',n}^i$ signifie que seule la i -ème ligne de la matrice $\mathbf{A}_{n',n}$ est prise en compte. La matrice de covariance :

$$\mathbf{A}_{n',n} = \text{Cov}\{\boldsymbol{\pi}_{n'}(c), \boldsymbol{\sigma}_n\} \quad (1.6.4)$$

et la variance

$$s_{n'} = \text{Var}\{\boldsymbol{\pi}_{n'}(c), \boldsymbol{\pi}_{n'}(c)\} \quad (1.6.5)$$

font appel à la matrice de covariance de la source entre deux instants, $\text{Cov}\{\boldsymbol{\sigma}_{n'}, \boldsymbol{\sigma}_n\}$. Suite à des tests sur des mesures synthétiques, un modèle de la corrélation de termes sources a été retenu. Dans ce modèle on suppose la structure verticale du profil connue et on décrit seulement des corrélations temporelles :

$$\text{Cov}\{\boldsymbol{\sigma}_{n'}, \boldsymbol{\sigma}_n\} = s_e^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{t_{n'} - t_n}{T_r}\right)^2\right), \quad (1.6.6)$$

où T_r est une échelle temporelle et s_e l'écart-type de l'erreur d'émission.

L'approche variationnelle utilisée dans [Politis et Robertson, 2004] repose sur une fonction coût de la forme :

$$J = \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^b\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\mu}_n - \boldsymbol{\pi}_n(c)\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\sigma}\|_{\mathbf{D}}^2, \quad (1.6.7)$$

où $\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_0, \dots, \boldsymbol{\sigma}_n)$ et \mathbf{B} est la matrice de covariance correspondante. Le dernier terme a été proposé dans le but d'imposer une source positive en supposant \mathbf{D} diagonale. Le terme $D_{kk} = 1$ si la k -ème composante de la source $\sigma_k < 0$ et $D_{kk} = 0$ dans les autres cas.

Ensuite, l'approche bayésienne avec la corrélation temporelle de termes sources de forme gaussienne, (1.6.6), et l'approche variationnelle ont été confrontées aux données réelles de l'expérience ETEX-I. Sous l'hypothèse de la localisation de la source connue, son profil temporel a été inversé. Les résultats ont été illustrés avec deux diagrammes de comparaison mesures-modèle. Un a été obtenu pour la vraie source, l'autre pour la source modifiée par l'assimilation de données. L'amélioration des résultats reposant sur la source modifiée est visible et peu de différences entre les deux approches d'assimilation de données ont pu être constatées. Le nuage modélisé à l'aide de la source modifiée est également montré. Cependant, le profil de la source inversée n'a pas été illustré.

1.6.2 Solutions de l'équation adjointe

La question de l'inversion de sources de rejets radioactifs avec une priorité sur leur localisation est posée par le contrôle du respect du traité CTBT (Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty). 80 stations de mesure de radionucléides dans l'atmosphère sont distribuées sur tout le globe. Le réseau fait partie de l'IMS (International Monitoring System) et est utilisé pour détecter les signatures d'explosion nucléaire. Ces

stations, dont 40 sont munies de détecteurs de gaz nobles, sont censées donner des mesures supplémentaires par rapport à l'information fournie par un réseau de détection sismique. Ce dernier n'est pas capable de discriminer l'onde de choc provenant d'une explosion chimique de celle issue d'une explosion nucléaire. Puisqu'une explosion nucléaire libère des produits de fission, la détection de ces derniers indique fortement qu'un tel événement a pu avoir lieu. Les radionucléides visés par le réseau sont ^{140}Ba et ^{133}Xe . Pour le premier, le seuil de dilution dépasse le volume de l'atmosphère. Le deuxième est un gaz noble, pratiquement impossible à contenir en cas d'essai nucléaire. Les capacités de détection de ces réseaux ont été étudiées dans [Pudykiewicz, 1998] pour ^{140}Ba , et dans [Hourdin et Issartel, 2006] pour ^{133}Xe . Mais ^{133}Xe a également le désavantage de faire partie des effluents provenant des centrales nucléaires ou des sources médicales. Suite à cette ambiguïté une série des travaux ayant pour but de discriminer une faible source civile d'une puissante source militaire a été lancée.

Le lien entre une source σ et des mesures μ a été déjà évoqué dans la section 1.1, équation (1.1.5). Il est défini par une matrice source-récepteur \mathbf{H} :

$$\mu = \mathbf{H}\sigma, \quad (1.6.8)$$

où nous avons négligé l'erreur ε . Puisque le nombre de mesures est plus petit que la taille de l'inconnue (vecteur source), l'utilisation des équations adjointes a été proposée. Le terme de forçage de l'équation adjointe, équation 1.1.6, coïncide avec la fonction de mesure et les solutions ainsi générées sont appelées *fonctions d'influence* ou *rétropanaches* dans cette étude. Le nom est lié au fait qu'une fonction d'influence exprime la contribution d'une source se trouvant en un point donné à la mesure qui a engendré la fonction. Pour certaines applications, ceci permet de remplacer le calcul en mode direct reposant sur l'espace des états de grande dimension par un calcul en mode adjoint basé sur l'espace des observations de dimension beaucoup moins élevée.

Fonctions d'influence

Bien avant que le problème de la vérification du respect du traité CTBT ne se pose, les fonctions d'influence ont été abordées dans un contexte de rejets accidentels de radionucléides. Un des premiers exemples de l'utilisation des solutions de l'équation adjointe dans ce contexte se trouve dans [Uliasz et Pielke, 1991]. D'abord, des trajectoires lagrangiennes ont été simulées suite à un rejet fictif émis dans un site de construction d'une centrale nucléaire en Pologne. Ensuite, pour deux récepteurs au voisinage du site, des fonctions d'influence ont été générées par un modèle eulérien. Leurs profils sur le site de l'accident ont été discutés.

L'approche variationnelle standard, utilisée dans les travaux présentés à la section 1.6.1, revient à minimiser l'écart entre des activités modélisées et mesurées en fonction des paramètres de la source. L'écart est mesuré par une fonction coût du type :

$$J = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \|\mu_i - \pi_i(c)\|^2. \quad (1.6.9)$$

Si on voulait l'utiliser pour localiser la source et non seulement pour inverser son débit comme dans [Robertson et Langner, 1997] ou [Politis et Robertson, 2004], un grand nombre d'inconnues (positions) rendrait la méthode difficilement applicable.

Pour contourner cette difficulté, un algorithme de reconstruction de sources qui s'appuie sur des solutions de l'équation adjointe a été proposée dans [Pudykiewicz, 1998]. Une superposition des impulsions, parmi lesquelles chacune représente la prise d'une mesure :

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^d \alpha_i \Theta(\mu_i - \mu_T) \mathcal{H}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}), \quad (1.6.10)$$

forme un terme de forçage de l'équation adjointe du type (1.1.6), page 7, et conduit à une fonction d'influence associée. Dans cette formule la somme \sum_i parcourt toutes les mesures μ_i , $\mathbf{x} = (x, y, z)$ est une position et t le temps, μ_T désigne un seuil de détection, Θ une fonction de Heaviside et finalement la structure horizontale d'une mesure prend forme :

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}) = \beta_i \exp\left(-\frac{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2}{2s_H^2}\right) \cdot \Theta(z_m - z),$$

avec z_m la hauteur du mélange, s_H un paramètre de la dispersion horizontale et α_i, β_i des coefficients. On regarde ensuite le support de la fonction d'influence c^* à l'instant du rejet, Γ_{t_0} , qui définit toutes les localisations possibles de la source. Les valeurs de la fonction d'influence servent à construire une densité de probabilité \mathcal{P} selon :

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{t_0}, \quad \mathcal{P}(\mathbf{x}) = \frac{c^*(\mathbf{x}, t_0)}{\int_{\Gamma_{t_0}} c^*(\mathbf{x}, t_0) d\mathbf{x}}.$$

L'endroit où la densité de probabilité atteint son maximum est considéré comme la position de la source. La quantité rejetée s'exprime à l'aide de l'inverse du maximum de la solution adjointe :

$$\frac{1}{\mathcal{P}_{\max} \cdot \int_{\Gamma_{t_0}} c^*(\mathbf{x}, t_0) d\mathbf{x}}.$$

La méthode sous-entend l'estimation correcte du temps de rejet. L'analyse des ratios de radionucléides dans le nuage détecté est proposée comme un moyen de l'estimer.

Une application de la méthode pour un rejet fictif est également décrite. Les mesures enregistrées par les stations de détection de ^{140}Ba servent à définir la solution adjointe et donc la densité de probabilité associée. Son maximum est localisé au voisinage du point de rejet et les autres valeurs élevées de \mathcal{P} se placent toutes au même endroit, ce qui rend la localisation unique.

En dehors du cadre du contrôle du traité CTBT, une approche similaire à celle exposée dans [Pudykiewicz, 1998] est présentée dans [Penenko *et al.*, 2002] où des tests de la méthode sur des mesures synthétiques, générées par un modèle local et global, sont discutés.

Matrice source-récepteur

Le lien (1.6.8) entre la source et les mesures s'exprime à l'aide de la matrice source-récepteur, \mathbf{H} . Pourquoi construire la matrice source - récepteur ? Remarquons d'abord qu'il s'agit d'un lien linéaire. Ensuite, si on connaît la source on peut accéder aux valeurs prédites aux stations de mesures par une simple multiplication. Par ailleurs, la matrice \mathbf{H} contient toute l'information importante sur la dispersion. Les valeurs de ses coefficients dans une colonne donnée reflètent l'information sur la manière dont les stations sont affectées par une source. Une ligne exprime la contribution de chaque

élément source à la mesure à la station associée. La matrice préconstruite est utilisée non seulement dans le but de déterminer les sources sur la base de mesures mais aussi pour effectuer des études de différents scénarios accidentels.

Remarquons qu'elle est rectangulaire, avec un petit nombre de lignes et un grand nombre de colonnes. L'utilisation du mode adjoint pour la construire efficacement, ligne par ligne, est donc évoquée dans nombreuses études. Nous insistons sur ce fait parce que cette approche sera également utilisée dans les applications développées dans les chapitres 3 et 4.

Un des objectifs de l'étude présentée dans [ApSimon *et al.*, 1989] était de raffiner des estimations du terme source de l'accident de Tchernobyl. À l'époque, les estimations reposaient sur les quantités de matière déposées exclusivement sur le territoire soviétique, section 1.4.2, donc sur les grosses particules. Par contre, les abondantes mesures radiologiques en Europe occidentale ont eu pour cause la matière en forme gazeuse et particules fines qui demeurent plus longtemps dans l'atmosphère et qui sont transportés à plus longues distances. Elles ont donc pu servir à obtenir une description complémentaire du terme source.

Le lien source-récepteur a été simplifié pour les besoins de l'étude présentée dans [ApSimon *et al.*, 1989]. La période de rejet a été divisée en 11 intervalles de 24 heures chacun. Une concentration observée μ_i a été exprimée à l'aide d'une somme des contributions de chaque sous-intervalle couvrant la durée du rejet selon :

$$\mu_i = \sum_{n=1,11} \theta_n \sigma_{n,i}, \quad (1.6.11)$$

où $\sigma_{n,i}$ est une contribution à la i -ème observation provenant de la matière émise le n -ème jour. Une régression linéaire a permis d'ajuster les coefficients θ_n et d'obtenir ainsi l'estimation de la source. Les valeurs retrouvées sous-estimaient des données soviétiques d'un facteur 2.

Un autre exemple de procédé d'estimation d'une source accidentelle peut être trouvé dans [Maryon et Best, 1995]. La relation linéaire entre l'estimateur de la source et le modèle est supposée parfaite, équation 1.6.8. La vraie source est estimée à la base de cette relation en s'appuyant sur l'approche des moindres carrés. Les premiers tests ont été effectués sur des expériences jumelles utilisant des mesures générées par un modèle lagrangien NAME (Nuclear Accident ModEl). Les perturbations introduites au sein du modèle pour bruite les mesures ont pris la forme d'un décalage de temps du rejet. À la suite des tests sur des mesures synthétiques, une reconstruction du débit de la source de Tchernobyl a été abordée. Une bonne reconstruction pour la période des premières 36 heures après le début de l'accident est présentée. Les débits reconstruits pour les deux périodes suivantes de 36 heures sont considérés comme du bruit et assimilés à des valeurs nulles. Le départ du nuage émis pendant cette période vers l'est et, par conséquent, le manque des mesures associées est évoqué comme une raison possible pour ce résultat.

Le lien source-récepteur est utilisé dans [Wotawa *et al.*, 2003, Seibert et Frank, 2004] pour résoudre le problème de la localisation d'une source. Dans [Wotawa *et al.*, 2003] les entrées de la matrice \mathbf{H} ont été calculées en combinant cinq modèles de transport atmosphérique. Dans [Seibert et Frank, 2004] le modèle lagrangien de dispersion,

Flexpart, est utilisé. Dans ce deuxième cas la matrice \mathbf{H} a été calculée à la fois par l'approche directe et en utilisant des trajectoires rétrogrades. Des tests de la cohérence des matrices \mathbf{H} calculées de deux manières différentes ont été effectués. L'accord n'est pas parfait à cause de la présence d'une composante stochastique et de la manière de prendre en compte la convection. Les tests similaires effectués dans le chapitre 4, section 4.2.3, rend cet accord quasiment parfait pour POLAIR3D et son adjoint construit automatiquement.

Remarquons que pour un nombre de mesures plus petit que le nombre d'inconnues le problème d'inversion d'une source selon l'équation (1.6.8) est mal posé. Comment donc choisir une source cohérente avec toutes les mesures disponibles? À cause de la sous-détermination, la résolution requiert l'utilisation de techniques de régularisation, [Wotawa *et al.*, 2003]. La régularisation est assurée par l'information supplémentaire qui permet de réduire l'ensemble des inconnues. Elle peut refléter le fait que la source est ponctuelle et d'une courte extension temporelle. La surface suspectée d'abriter une source peut être réduite si on se restreint aux points au voisinage du point de détection. Les mailles qui correspondraient aux très petits éléments de la matrice \mathbf{H} et conduiraient donc aux sources excessivement élevées, ainsi que les mailles impliquant les sources au-dessous du niveau de détection, peuvent également être éliminées.

Pour retrouver la source on doit résoudre le système linéaire (1.6.8). Une approche alternative est évoquée dans [Wotawa *et al.*, 2003] et consiste en l'essai de plusieurs sources. Dans ce deuxième cas, il s'agit de comparer aux mesures plusieurs ensembles de concentrations. Chaque ensemble est prédit sur la base d'une des nombreuses sources envisageables. Parmi tous les scénarios possibles, les coefficients de la régression linéaire indiqueraient le scénario le plus probable.

Un exemple d'application faisant appel aux mesures synthétiques pour un rejet hypothétique en Australie est présenté dans [Wotawa *et al.*, 2003]. Plusieurs dizaines de milliers d'ensemble de mesures ont été générés par la matrice source-récepteur pour toutes localisations possibles de la source. Des coefficients de corrélation entre les mesures obtenues en mode direct et chaque ensemble de mesures générées par la matrice \mathbf{H} ont été calculés. Il s'avère que le plus grand correspondait aux mesures générées par \mathbf{H} à l'aide une source localisée au lieu de l'accident.

Le problème abordé dans [Seibert et Frank, 2004] est de connaître la provenance du ^{137}Cs mesuré dans certains endroits depuis la catastrophe de Tchernobyl. Plus particulièrement, les mesures rassemblées à Stockholm en octobre 2000 y font l'objet d'étude. Il est probable que la matière provient de la resuspension des radionucléides dans des régions fortement contaminées. Par conséquent les régions affectées au niveau dépassant 100 kBq.m^{-2} en Ukraine, Biélorussie et Russie, ainsi que le sarcophage du réacteur de Tchernobyl, qui n'est pas entièrement imperméable, sont considérés comme sources potentielles. Les valeurs de l'activité volumique à Stockholm sont ensuite calculées en s'appuyant sur la matrice de transfert \mathbf{H} . Elles s'accordent aux mesures avec le coefficient de corrélation 0.94. Si, par contre, la source est restreinte au voisinage le plus proche de la centrale, le coefficient de corrélation modèle - mesure diminue. Autrement dit, les activités volumiques produites par la relation (1.6.8) reproduisent moins bien les mesures. Par conséquent il a été conclu qu'au moins une partie du césium enregistré à Stockholm provient de la resuspension dans les régions contaminés.

Méthode du simplexe

Les travaux présentés dans [Wotawa *et al.*, 2003] ont fait appel aux mesures synthétiques. Des tests de modélisation inverse sur les premières mesures rassemblées par des stations du réseau de CTBT ont été ensuite effectués dans [Issartel et Baverel, 2003]. Certaines des stations situées dans les régions industrielles peuvent détecter des signaux dont l'origine sont des effluents des centrales nucléaires ou des sources de radiothérapie utilisées dans des hôpitaux. Il est possible que non seulement une mais plusieurs de ces stations enregistrent simultanément des activités volumiques significatives. Ces circonstances impliquent soit une source importante de radionucléides, éventuellement une explosion, soit plusieurs petites sources en amont des stations de mesure. Des essais de discrimination entre les deux situations sont présentés dans [Issartel et Baverel, 2003]. L'approche a été validée sur l'expérience ETEX et appliquée ensuite aux mesures rassemblées à Freiburg en Allemagne.

Une seule mesure enregistrée à Freiburg a été étudiée dans un premier temps. En faisant appel à la solution adjointe c^* associée à cette mesure certaines localisations de la source ont été éliminées. En effet, en s'appuyant sur l'équation de mesure en forme duale, équation (1.1.8) dans la section 1.1 et (4.2.11) dans le chapitre 4 :

$$\mu = \int c^*(\mathbf{x}, t) \sigma(\mathbf{x}, t) dt, \quad (1.6.12)$$

une minoration :

$$\sigma(\mathbf{x}) \geq \frac{\mu}{\max_t c^*(\mathbf{x}, t)} \quad (1.6.13)$$

a été proposée. La valeur de l'observation μ a permis d'éliminer des régions qui nécessiteraient une source d'ampleur déraisonnable pour expliquer la mesure étudiée. Parmi ceux qui n'ont pas été écartées, les régions industrielles au nord-ouest de Freiburg ou un hôpital à Freiburg ont été considérées comme les localisations les plus probables.

Dans un deuxième temps des contraintes supplémentaires ont été imposées grâce à trois autres mesures provenant de cette station. Les contraintes prennent la forme :

$$\mu_{i, \min} \leq \int c_i^*(\mathbf{x}, t) \sigma(\mathbf{x}, t) dt \leq \mu_{i, \max} \quad \text{avec } i \in \{1, 2, 3, 4\}, \quad (1.6.14)$$

où le fait de relâcher la contrainte (1.6.12) introduit une erreur de mesure et du modèle. Le système de quatre contraintes a été résolu grâce à l'utilisation de la méthode du simplexe. L'algorithme parvient à restreindre la localisation possible de la source davantage qui se résume à une région étroite originaire à Freiburg et traversant la France, la Belgique et le Royaume-Uni. Mais il est impossible de discriminer au sein de cette région une source proche d'une source éloignée. Pour cela des bénéfices liés à l'utilisation de mesures hypothétiques, nulles ou non-nulles, provenant d'autres stations, notamment de Stockholm, ont été analysés. Seulement le deuxième cas aurait permis d'éliminer une source proche. En effet, il a été suggéré dans [Issartel et Baverel, 2003] que la vraie source aurait été localisée à l'intersection des rétropanaches correspondants aux mesures rassemblées à ces deux stations.

1.6.3 Estimation du terme source à l'aide du filtre de Kalman

Quand, au bout de dix ans de développement, le projet RODOS a acquis une certaine maturité, la question d'estimation du terme source a été évoquée. Récemment,

une implémentation du filtre de Kalman étendu pour l'estimation des paramètres du panache gaussien a été présentée dans [Drews, 2005]. Ces travaux sont à l'approche de ceux qui seront présentés dans le chapitre 3 de cette thèse pour un modèle à bouffées gaussiennes.

Le vecteur d'état \mathbf{X}_n est constitué de certains paramètres du modèle : le débit divisé par la vitesse du vent, la hauteur de la source et la direction du vent, $\mathbf{X} = (\frac{\dot{q}}{u}, h, \theta)$ respectivement. Remarquons que contrairement à l'approche que nous proposons dans le chapitre 3, les paramètres de la turbulence décrivant la croissance géométrique du panache n'apparaissent pas comme composantes du vecteur d'état. La cause évoquée de cette absence est la moindre sensibilité des résultats à cette dernière classe de paramètres, le fait que nous avons observé également.

On suppose que les variables d'état évoluent selon la marche aléatoire :

$$\mathbf{X}_n = \mathbf{X}_{n-1} + \boldsymbol{\eta}_n, \quad (1.6.15)$$

où $\boldsymbol{\eta}_n$ est un bruit blanc gaussien : $\boldsymbol{\eta}_n \sim N(0, \mathbf{Q})$ dont la matrice de covariance d'erreur ne varie pas en temps. Le processus d'observation s'écrit :

$$\boldsymbol{\mu}_n = H_n(\mathbf{X}_n) + \boldsymbol{\varepsilon}_n. \quad (1.6.16)$$

Remarquons que, comme dans la section 1.5.2, le lien entre les composantes du vecteur d'état \mathbf{X}_n et les mesures est donné par un modèle gaussien, notamment du panache gaussien :

$$\chi(\mathbf{x}; \frac{\dot{q}}{u}, h, \theta) = \frac{\dot{q}}{2\pi u s_y s_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2s_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(z-h)^2}{2s_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+h)^2}{2s_z^2}\right) \right]$$

où $\mathbf{x} = (x, y, z)$ représente des coordonnées géométriques et s_y, s_z les paramètres de la dispersion. Puisque le vecteur de mesures consiste en de débits de dose donnés par la relation du même type que l'équation (1.5.17) :

$$G(x_d, y_d, z_d) \sim \int_{-\infty}^{\infty} B(r_d) \chi(\mathbf{x}; \frac{\dot{q}}{u}, h, \theta) d\mathbf{x},$$

l'opérateur d'observation \mathbf{H}_n survient suite à une linéarisation à chaque pas n de temps selon :

$$(\mathbf{H}_n)_{ij} = \frac{\partial G_i}{\partial X_j}(\mathbf{X}_n), \quad (1.6.17)$$

où \mathbf{X}_n est le vecteur d'état à l'instant t_n et X_j sa j -ème coordonnée. L'erreur d'observation $\boldsymbol{\varepsilon}_n$ est décrite par une distribution gaussienne : $\boldsymbol{\varepsilon}_n \sim N(0, \mathbf{R})$.

Pour le modèle dynamique donné par l'équation (1.6.15), les équations d'évolution pour le filtre de Kalman (voir les équations 1.5.6 - 1.5.7 dans la section précédente) se réduisent à :

$$\mathbf{X}_n^f = \mathbf{X}_{n-1}^a, \quad (1.6.18)$$

$$\mathbf{P}_n^f = \mathbf{P}_{n-1}^a + \mathbf{Q}, \quad (1.6.19)$$

pour la prévision, et la correction par les mesures prend la forme :

$$\mathbf{X}_n^a = \mathbf{X}_n^f + \mathbf{K}_n(\boldsymbol{\mu}_n - H_n(\mathbf{X}_n^f)), \quad (1.6.20)$$

$$\mathbf{P}_n^a = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n \mathbf{H}_n) \mathbf{P}_n^f, \quad (1.6.21)$$

avec la matrice de gain donnée par l'équation (1.5.8). Des paramètres du filtre de Kalman, c'est-à-dire les matrices de covariance \mathbf{Q} et \mathbf{R} ainsi que des estimations initiales pour le vecteur d'état, $\mathbf{X}_0^f, \mathbf{P}_0^f$, sont obtenus selon le principe du maximum de vraisemblance en utilisant toutes les mesures disponibles, avant que l'assimilation séquentielle ne commence.

L'algorithme a été testé sur des mesures synthétiques bruitées, le bruit étant de 20% de valeur moyenne de la dose simulée. Il a ensuite été appliqué à l'assimilation de vraies mesures provenant de rejets de routine de ^{41}Ar d'un réacteur de recherche à Mol en Belgique. À côté des valeurs des paramètres filtrés, des mesures du champ de vent, des paramètres de la turbulence et de la hauteur du panache ont été également effectuées pour pouvoir ensuite les comparer aux estimations du filtre de Kalman. Les estimations de \hat{q}/u sont d'un facteur 2 – 3 plus grandes que les valeurs mesurées. Ce facteur reste en conformité avec l'écart modèle-mesures dans le cas d'utilisation du vrai terme source. Autrement dit \hat{q}/u est estimé avec la même exactitude que le modèle reproduit les mesures sur la base de la vraie source.

La modélisation inverse des sources de traceurs est un sujet d'actualité. Récemment, dans [Bocquet, 2006], l'inversion 3D de la source d'ETEX-I a été effectuée avec la méthode du maximum d'entropie, que nous allons décrire dans le chapitre 4. À présent, l'inversion de la source de l'accident de Tchernobyl fait l'objet d'études rapportées dans [Davoine, 2006] et annoncées dans [Sofiev *et al.*, 2006b].

1.7 Conclusions

Nous avons exposé dans ce chapitre des circonstances qui peuvent ou qui ont conduit aux rejets radioactifs dans l'atmosphère. Nous espérons que nous avons sensibilisé le lecteur aux difficultés auxquelles doivent faire face les modélisateurs qui veulent prédire la dispersion des radionucléides émis par des sources accidentelles. L'amélioration des capacités prédictives des modèles passe sans doute par l'amélioration de la description des processus physiques et par le raffinement des champs météorologiques. Mais une direction alternative est également explorée par les chercheurs. Elle consiste en l'utilisation de l'information apportée par les mesures pour compléter le processus de modélisation.

Tout un spectre d'approches d'assimilation de données est utilisé dans le domaine de la dispersion de radionucléides. Des exemples faisant appel au filtre de Kalman, à l'approche variationnelle ou bayésienne ont été décrits. Des applications peuvent avoir comme objectif exclusivement l'amélioration de prévisions [Puch et Astrup, 2004], l'amélioration de prévisions passant par une modification du terme source comme par exemple dans [Politis et Robertson, 2004] ou l'estimation du terme source abordée dans [Robertson et Langner, 1997, Issartel et Baverel, 2003].

Pourquoi estimer le terme source ? En général, la reconstruction de sources de polluants sur la base de mesures aide à améliorer la compréhension de processus responsables du changement climatique, vérifier le respect des États ou de l'industrie envers des obligations de réduction des émissions ou l'interdiction des essais nucléaires. L'approche variationnelle et les matrices de transfert sont fréquemment utilisées dans ces cas. Par ailleurs, nous nous sommes attardés dans ce chapitre sur le fait que l'accident grave survenant dans une centrale nucléaire est un événement dont les conséquences peuvent être très importantes. Dans ce cas particulier, pour estimer ces conséquences,

la connaissance du terme source est indispensable.

En général l'assimilation de données emploie des mesures dans le but de modifier les conditions initiales et éventuellement des paramètres d'un modèle. La modification des conditions initiales peut réduire l'influence de l'erreur modèle et améliore pratiquement toujours la prévision. Pour la dispersion de traceurs passifs l'assimilation de données variationnelle passe nécessairement par une modification du terme source. Cette modification peut compenser l'erreur modèle mais ne conduit pas nécessairement au vrai terme source. En effet, l'état initial modifié ne sera pas nécessairement plus proche de la vérité qu'avant le procédé de l'assimilation de données. Un décalage supplémentaire par rapport à la vraie source est tout à fait envisageable. Mais la reconstruction d'un terme source est un succès seulement si le résultat coïncide avec la vraie source. La présence de l'erreur modèle est donc beaucoup plus pénalisante pour le procédé de reconstruction des sources et on peut l'espérer seulement en conjonction avec un modèle dont les prévisions sont d'une bonne qualité.

Chapitre 2

Les modèles utilisés. Validation

2.1 Modélisation de la dispersion

La dispersion des traceurs passifs ou des espèces soumises aux réactions d'ordre un, comme des radionucléides, est modélisée à l'aide de l'équation de transport, évoquée déjà dans la section 1.1, équation (1.1.1) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) - \lambda c = \sigma. \quad (2.1.1)$$

Cette équation est définie au sein du domaine $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$ où \mathcal{D} est un domaine spatial et $[0, \tau]$ l'intervalle du temps. Pour la dispersion des radionucléides $c(\mathbf{x}, t)$ est une activité volumique. $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ est un champ du vent et $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ paramétrise la diffusion turbulente. À l'échelle continentale, \mathbf{K} est un tenseur diagonal avec des composantes K_{xx} , K_{yy} , d'influence limitée, et la diffusion verticale $K_{zz}(\mathbf{x}, t)$ décrite par une paramétrisation appropriée. Cette paramétrisation sera décrite séparément pour le modèle à bouffées PX0.1 (section 2.2) et ensuite pour le modèle de chimie-transport POLAIR3D (section 2.3). $\sigma(\mathbf{x}, t)$ est un champ de forçage donc, pour des rejets accidentels, une source restreinte en espace et limitée en temps. $\lambda(\mathbf{x}, t)$ représente des processus d'appauvrissement comme le lessivage et la décroissance radioactive et dont la description se trouve dans la section 2.3. Si plusieurs espèces sont suivies dans la simulation, le champ c est remplacé par un vecteur de champs de concentration \mathbf{c} et λ par une matrice cinétique.

Dans le contexte d'un rejet accidentel, les conditions aux limites s'expriment à l'aide de :

$$\forall (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_+, \quad c(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.1.2)$$

où $\partial\Omega_+$ est une partie du domaine qui correspond au vent entrant. Les conditions initiales sont :

$$\forall \mathbf{x}, \quad c(\mathbf{x}, 0) = 0. \quad (2.1.3)$$

Nous supposons que le flux diffusif au sol englobe le dépôt sec :

$$(\mathbf{K}\nabla c) \cdot \mathbf{n} = v_d c, \quad (2.1.4)$$

où \mathbf{n} est un vecteur normal à la surface orienté à l'extérieur et v_d est la vitesse du dépôt sec, et est nul sur d'autres bords.

2.2 Dispersion à petite échelle - modèle à bouffées de l'IRSN/ECL

Dans un réacteur à eau sous pression qui compte parmi les plus courants en France, l'évolution d'un accident est en général lente. Une certaine marge de temps est envisageable entre l'instant où les indices d'un problème apparaissent et le rejet de la radioactivité dans l'atmosphère a lieu. Le temps peut être utilisé pour fournir aux services responsables l'information sur l'endroit et le niveau de contamination. Ces informations permettent de se focaliser sur la préparation de contre-mesures.

L'estimation des conséquences se fait avec un modèle de dispersion atmosphérique. La marge de temps étant de durée limitée, le modèle doit fournir l'évaluation d'impact du rejet rapidement. Ces exigences imposent l'utilisation d'un modèle fiable mais en même temps facile à exécuter. Pour cela un modèle gaussien a été choisi par le centre de crise de l'IRSN. Des modèles gaussiens ont besoin d'un nombre limité d'informations d'entrée et ne consomment pas beaucoup de temps. Des résultats fournis sont fiables pour la dispersion en champ proche. Ces qualités, malgré d'évidentes limitations pour des études plus sophistiquées, font de ce modèle un excellent candidat à l'usage opérationnel. Une description plus détaillée des modèles gaussiens peut-être trouvée dans [Straka *et al.*, 1981], [Seinfeld et Pandis, 1998] ou [Arya, 1999]. Nous nous limitons dans cette section à une description nécessaire pour pouvoir ensuite bien expliquer l'enjeu de l'assimilation de données entreprise à la base de ce modèle, chapitre 3.

2.2.1 Modèle à bouffées gaussiennes

Une bouffée est une solution de l'équation d'advection-diffusion :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) = \sigma,$$

obtenue sous l'hypothèse du tenseur \mathbf{K} diagonal avec les composantes K_{xx} , K_{yy} , K_{zz} constantes et de l'instantanéité de la source : $\sigma(\mathbf{x}, t) = q_p \cdot \delta(\mathbf{x}, t)$. Cette forme du terme source suppose que l'émission a lieu à l'origine. L'équation provient directement de l'équation (2.1.1) mais, étant destinée à modéliser un traceur passif dans une soufflerie, ne prend pas en compte les processus d'appauvrissement. Une des méthodes pour obtenir des solutions analytiques à cette équation consiste à séparer les variables et employer la transformée de Fourier (voir [Seinfeld et Pandis, 1998], page 908).

En réalité, la source n'est pas instantanée mais a un débit variable, étendu en temps. Pour la décrire on divise l'intervalle $[0, \tau]$ en sous-intervalles caractérisés par un débit constant. Une bouffée est relâchée à chaque nœud temporel emportant avec elle l'activité émise pendant le pas de temps correspondant. Le rejet continu est donc modélisé à l'aide d'une suite des bouffées émises instantanément.

Cette approche, en demeurant analytique, permet non seulement de prendre en compte un débit variable mais aussi d'incorporer dans le modèle des effets de la variabilité des conditions météorologiques. En effet, chaque bouffée est advectée par le champ de vent interpolé à la position de son centre de masse et le mouvement est indépendant d'une bouffée à l'autre. Ensuite, la concentration, ou l'activité dans le cas d'un rejet radioactif, est calculée comme une superposition des contributions provenant de toutes les bouffées qui se trouvent actuellement dans le domaine.

L'activité en un point (x, y, z) et à l'instant t s'exprime à l'aide de la formule suivante :

$$\begin{aligned} \chi(x, y, z, t) = & \frac{1}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{puff}}} \frac{\dot{q}_p^{(i)} \cdot \Delta t}{(K_{xx} K_{yy} K_{zz})^{\frac{1}{2}}} \\ & \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_p^{(i)})^2}{4K_{xx}t}\right) \cdot \exp\left(-\frac{(y - y_p^{(i)})^2}{4K_{yy}t}\right) \\ & \cdot \left[\exp\left(-\frac{(z - z_p^{(i)})^2}{4K_{zz}t}\right) + \exp\left(-\frac{(z - (2 \cdot z_g^{(i)} - z_p^{(i)}))^2}{4K_{zz}t}\right) \right. \\ & \left. + \exp\left(-\frac{(z - (2 \cdot (h_{\text{ABL}} + z_g^{(i)}) - z_p^{(i)}))^2}{4K_{zz}t}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

En général, $*_p^{(i)}$ désigne la variable $*$ associée à la i -ème bouffée (p =puff). $\dot{q}_p^{(i)}$ est le débit de la source à l'instant $t_{i-1} = (i-1) \cdot \Delta t$, où Δt est le pas de temps d'émission. En conséquence, $\dot{q}_p^{(i)} \cdot \Delta t$ désigne l'activité emportée par la i -ème bouffée. Les coordonnées $x_p^{(i)}$, $y_p^{(i)}$, $z_p^{(i)}$ du centre de masse de la i -ème bouffée évoluent selon :

$$\begin{aligned} x_{p, n}^{(i)} &= x_{p, n-1}^{(i)} + u_{n-1}^{(i)} \Delta t \\ y_{p, n}^{(i)} &= y_{p, n-1}^{(i)} + v_{n-1}^{(i)} \Delta t \\ z_{p, n}^{(i)} &= z_{p, n-1}^{(i)} + w_{n-1}^{(i)} \Delta t. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Les composantes de la vitesse dans les directions X , Y et Z sont notées par $u^{(i)}$, $v^{(i)}$ et $w^{(i)}$ respectivement. L'exposant (i) signifie que les composantes de la vitesse du vent sont interpolées à la position du centre de masse de la i -ème bouffée. Le temps $t = N_{\text{puff}} \cdot \Delta t$, où N_{puff} est le nombre de bouffées relâchées. Remarquons enfin que l'activité volumique prédite par le modèle est notée χ .

Nous avons déjà mentionné qu'il est nécessaire de fournir une paramétrisation du tenseur de la diffusion turbulente \mathbf{K} . En effet, en posant :

$$\begin{aligned} s_x^2 &= 2K_{xx}t \\ s_y^2 &= 2K_{yy}t \\ s_z^2 &= 2K_{zz}t, \end{aligned}$$

on fait un lien entre l'approche eulérienne reposant sur \mathbf{K} et l'approche lagrangienne s'appuyant sur des densités de probabilité de concentration. s_x, s_y, s_z sont des écarts-types de ces densités de probabilité. Néanmoins, ceci n'est pas une paramétrisation mais seulement une manière de repousser la nécessité de la trouver sur un autre niveau.

En effet, la turbulence atmosphérique est un facteur déterminant le mélange d'un polluant dans l'air. Elle a des effets majeurs sur la taille du panache. Il est donc nécessaire de bien estimer l'intensité de turbulence et dans un deuxième temps de modéliser correctement son impact sur la taille des bouffées.

En s'appuyant sur des expériences menées in situ, des schémas de classification de la turbulence en six classes de stabilité ont été proposés par [Pasquill, 1961]. La dépendance de la taille d'une bouffée en fonction de la distance par rapport à la source, pour ces classes a été explorée par [Gifford, 1961] donnant lieu au modèle de Pasquill-Gifford.

Les travaux de Pasquill et Gifford ont été enrichis par d'autres expériences et ont permis à [Turner, 1969] et indépendamment à [Briggs, 1973] d'établir d'autres paramétrisations pour décrire la croissance de la taille d'une bouffée en fonction de la stabilité de l'atmosphère.

Dans le cas du modèle de l'IRSN/ECL, pX0.1, la croissance des écarts-types dans le deux directions horizontales est décrite par le modèle de Doury. La particularité de ce modèle est liée à des expériences qui ont servi à les établir. En effet il s'agit des mesures obtenues sur des rejets de radionucléides associés aux essais nucléaires. En plus, les mesures ont été réalisées sur un terrain plus grand que celui qui a servi d'appui à Turner ou Briggs.

Il est également à noter qu'un autre modèle, franco-allemand, a été développé [Crabot *et al.*, 1999] suite aux différences de modèles utilisées en cas de crise par la France (modèle de Doury) et l'Allemagne (Pasquill-Gifford).

Une description du modèle de Doury peut être trouvée dans [Doury, 1976] :

$$s_{h,n}^{(i)} = s_{h,n-1}^{(i)} + k_h A_h \left(s_{h,n-1}^{(i)} \right)^{\frac{k_h-1}{k_h}}, \quad (2.2.3)$$

où $s_x \equiv s_h \equiv s_y$. Dans la direction verticale les valeurs des coefficients k_z et A_z dépendent de la stabilité de l'atmosphère. Par conséquent, l'écart-type le long de l'axe Z s'exprime à l'aide de la somme pondérée des résultats pour l'atmosphère neutre et stable ou autrement dit pour la diffusion normale (ND) et faible (WD) :

$$s_{z,n}^{(i)} = s_{z,n-1}^{(i)} + (1 - \text{stab}) \cdot k_z^{\text{ND}} A_z^{\text{ND}} \left(s_{z,n-1}^{(i)} \right)^{\frac{k_z^{\text{ND}}-1}{k_z^{\text{ND}}}} + \text{stab} \cdot k_z^{\text{WD}} A_z^{\text{WD}} \left(s_{z,n-1}^{(i)} \right)^{\frac{k_z^{\text{WD}}-1}{k_z^{\text{WD}}}}. \quad (2.2.4)$$

La variable *stab* prend des valeurs dans l'intervalle $[0, 1]$ et désigne la proportion de la diffusion faible contribuant à la stabilité de l'atmosphère. La hauteur de la couche limite atmosphérique est désignée par h_{ABL} et $z_g^{(i)}$ est la hauteur par rapport au niveau zéro. Les valeurs des paramètres introduits dans cette section peuvent être retrouvées dans l'annexe B.1.3.

Au final, la concentration d'activité en (x, y, z, t) s'écrit :

$$\begin{aligned} \chi(x, y, z, t) = & \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{puff}}} \frac{\dot{q}_p^{(i)} \cdot \Delta t}{s_x^{(i)} s_y^{(i)} s_z^{(i)}} \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_p^{(i)})^2}{2s_x^{(i)2}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{(y - y_p^{(i)})^2}{2s_y^{(i)2}}\right) \\ & \cdot \left[\exp\left(-\frac{(z - z_p^{(i)})^2}{2s_z^{(i)2}}\right) + \exp\left(-\frac{(z - (2 \cdot z_g^{(i)} - z_p^{(i)}))^2}{2s_z^{(i)2}}\right) \right. \\ & \left. + \exp\left(-\frac{(z - (2 \cdot (h_{\text{ABL}} + z_g^{(i)}) - z_p^{(i)}))^2}{2s_z^{(i)2}}\right) \right]. \quad (2.2.5) \end{aligned}$$

2.2.2 Expérience dans la soufflerie

Des mesures utilisées dans ces études proviennent d'une expérience qui a été menée dans une soufflerie de l'ECL. Une maquette de la centrale nucléaire du Bugey, à l'échelle 1 : 500, a été utilisée pour effectuer l'expérience de dispersion. La maquette est illustrée sur la figure 2.2.1. On voit sur cette photo que le terrain aux environs de la centrale est relativement plat, les obstacles les plus importants étant des tours aéroréfrigérantes

qui atteignent 140 mètres. En la regardant de plus près on remarque quatre bâtiments réacteurs en forme cylindrique. Sur un plan, que ce soit la figure 2.2.2, 2.2.3 ou B.1.1 dans l'annexe B.1, les quatre anneaux représentent les tours aéroréfrigérantes et les quatre cercles (groupés par deux) au sud des tours correspondent aux réacteurs.

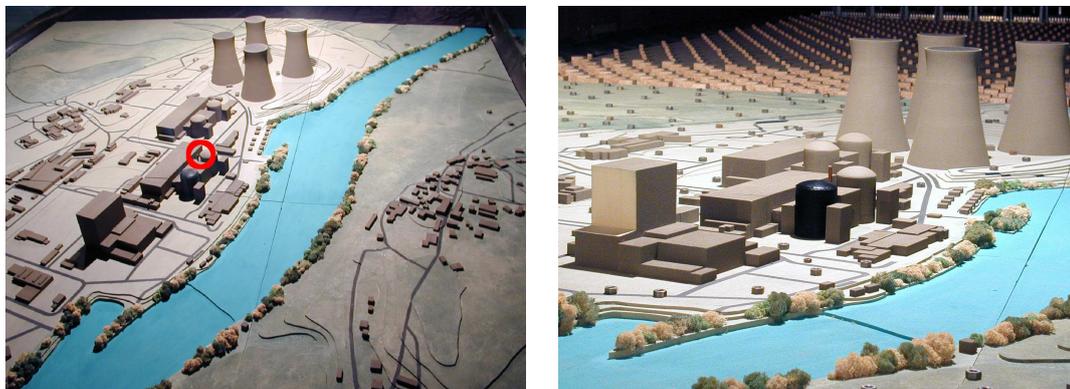


Fig. 2.2.1 – Deux photos de la maquette de la centrale du Bugey utilisée dans l'expérience en soufflerie (remerciements à l'IRSN et l'ECL). La cheminée servant comme une source ponctuelle est entourée à gauche et son sommet est visible à droite, entre les réacteurs au premier plan

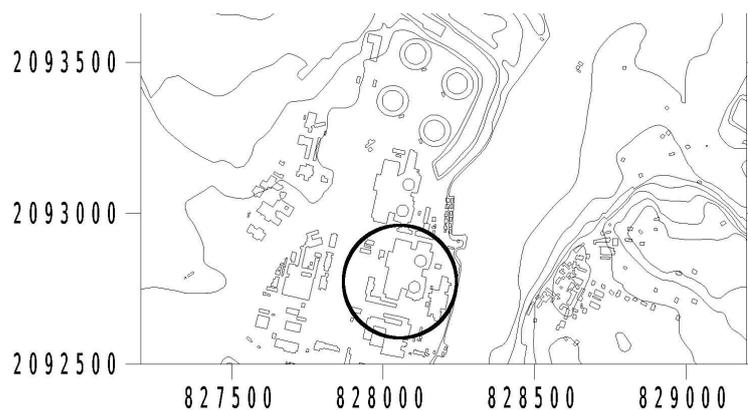


Fig. 2.2.2 – Un zoom sur le plan de la maquette du Bugey (remerciements à l'IRSN et l'ECL). Les quatre anneaux représentent des aéroréfrigérants. Des cercles, correspondent aux quatre réacteurs groupés par deux tranches de deux. La tranche encadrée contient la cheminée (pas visible sur le plan) attachée au réacteur nord et simulant une source ponctuelle et le bâtiment réacteur sud imitant une source diffuse. Ce dernier est également le centre des systèmes de coordonnées utilisés, voir figure B.1.1 dans l'annexe B.1

Pour simuler le rejet de contaminant radioactif, on suit une émission d'éthane. Le rejet a eu lieu dans un écoulement turbulent stationnaire et le dépôt du gaz était négligeable. Les mesures ont été collectées pour deux directions de vent dominant sur le site réel, notamment un vent du nord et du sud. Dans les deux cas principaux, l'impact d'un rejet provenant d'une source ponctuelle (cheminée) et diffuse (bâtiment réacteur) a été examiné. Les mesures sont constituées de profils de concentration et de la vitesse du vent. Ce sont principalement les premières qui nous intéressent dans ces travaux. Elles ont été faites au niveau du sol et ensuite dans quatre plans horizontaux (à 25 m, 50 m, 100 m, 150 m). Elles ont été prises jusqu'à la distance horizontale de

5000 m par rapport à l'origine. À tous les niveaux plusieurs profils de concentration, transversaux à la vitesse du vent ont été mesurés avec un nombre des points de mesure qui, à une exception près, diminue avec la hauteur. Dans chacun des points les mesures de la concentration ont été prises pratiquement instantanément, plus précisément avec la fréquence de 1000 Hz sur une période d'une minute. Ceci a permis d'accéder à la valeur moyenne ainsi qu'à l'écart-type des fluctuations. Les valeurs de concentration ont été ensuite transformées en activités. [Méjean, 2003] estime l'erreur relative d'une mesure instantanée à 8% de sa valeur. Puisque la valeur moyenne en un point donné est obtenue sur la base d'au moins $N_{\text{mes}} = 60000$ mesures, l'erreur associée se comportant comme $\frac{1}{\sqrt{N_{\text{mes}}}}$ est négligée dans cette étude.

Dans ces travaux on s'appuie sur des mesures collectées au sol et associées à une source considérée comme ponctuelle et localisée au sommet d'une cheminée attachée aux bâtiments réacteurs, voir figure 2.2.1. Pour les deux directions du vent les mesures ont été enregistrées jusqu'à 2500 mètres par rapport à l'origine. Au total, il y avait 328 points de mesure pour le vent du sud et 236 points de mesure pour le vent du nord. La localisation des points de mesure est illustrée sur la figure 2.2.3.

2.2.3 Comparaison modèle-mesures

Cette section est consacrée à la présentation d'une comparaison entre les prévisions du modèle direct et les mesures. Certains profils d'activité sont montrés dans les figures 2.2.4 et 2.2.5. Il s'agit de l'ensemble de 4 profils pour chacune direction du vent. Les profils mesurés (losanges) sont superposés sur des résultats du calcul fournis par le modèle direct. On remarque qu'il est difficile pour le modèle direct de reproduire les profils d'activité à la proximité de la source (figure 2.2.5 (a) à la distance de 80 mètres). Mais des caractéristiques d'un profil gaussien se développent progressivement en fonction d'une distance croissante par rapport à la source. Cette forme est atteinte plus rapidement pour le vent du nord (le profil à 450 mètres dans la figure 2.2.5(b) pour le vent du nord ressemble plus à un profil gaussien que le profil à 450 m dans la figure 2.2.4(b) pour le vent du sud). Pour le vent du nord, figure 2.2.5, le profil calculé est systématiquement décalé par rapport aux sorties du modèle direct dans le plan perpendiculaire à la vitesse du vent. Le décalage augmente en aval de la source pour atteindre 200 m à la sortie du domaine, figure 2.2.5(d). Bien que de moindre ampleur, 50 m dans la figure 2.2.4(d), le décalage est aussi présent pour le vent du sud. La raison principale de déplacement du panache expérimental est la présence des tours aéroréfrigérantes, cet obstacle n'étant pas pris en compte par la modélisation. En particulier, pour le vent du sud, figure 2.2.4, la dispersion horizontale du panache réel est plus importante que celle prédite par le modèle. En même temps, pour le vent du nord, figure 2.2.5, la dispersion horizontale du panache est plus correctement reproduite par le modèle mais des concentrations mesurées dans la proximité du rejet dépassent largement celles qui ont été modélisées. Le flux total du polluant étant conservé, la présence des tours réduit dans ce cas la dispersion verticale.

Schématiquement, le nuage de polluants doit parcourir autour de 500 mètres pour que la section transversale du panache s'approche de la courbe en cloche, caractéristique d'un modèle gaussien. En général, le modèle arrive à rendre bien la forme des profils obtenus par la voie expérimentale et il marche mieux pour le vent du sud que pour le vent du nord. La suite de ce travail concernera l'emploi de l'information contenue dans ces mesures pour améliorer les sorties du modèle. Nous y reviendrons dans le chapitre 3.

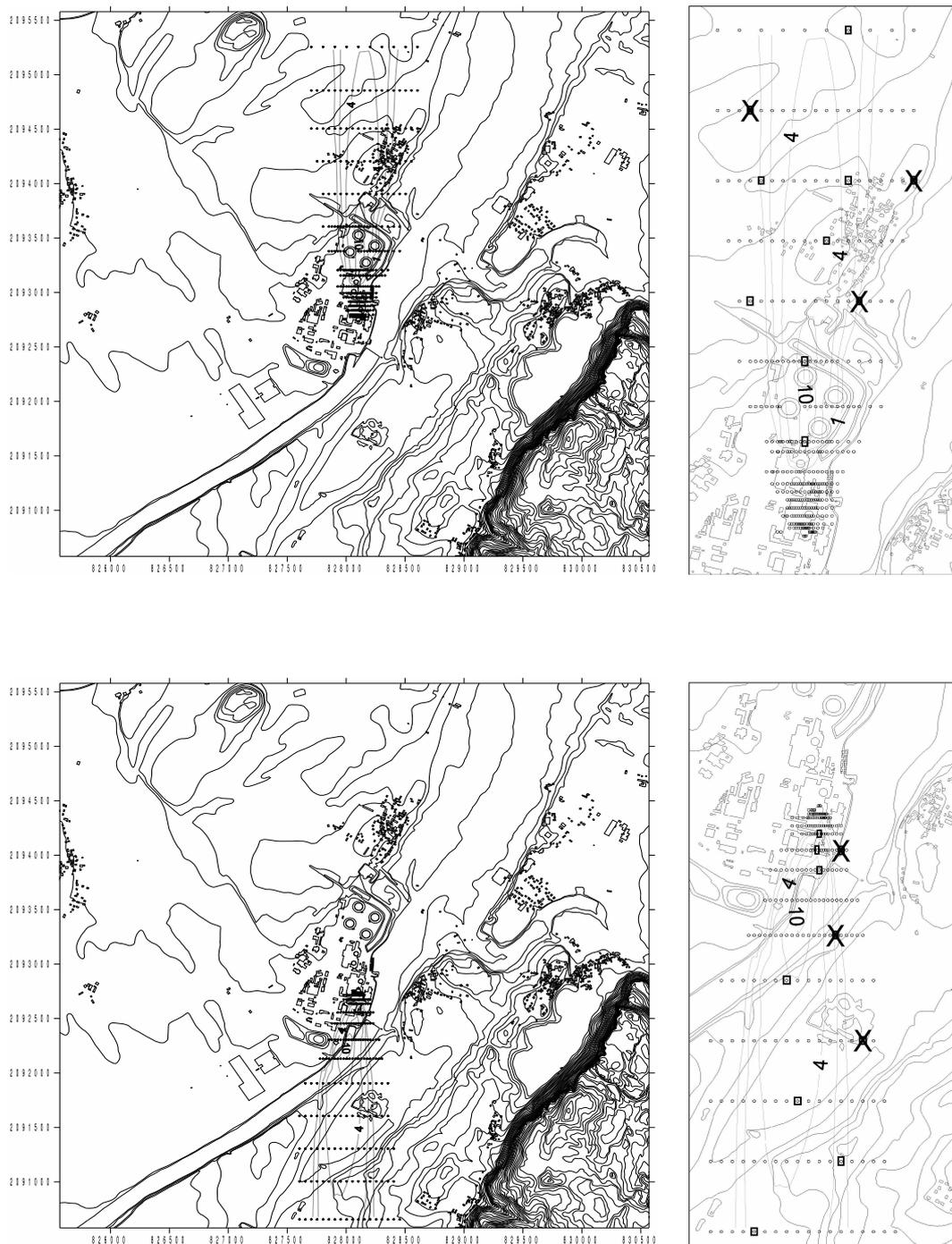


Fig. 2.2.3 – Les figures dans la première ligne illustrent la configuration pour le vent du sud, celles dans la ligne en bas la configuration pour le vent du nord. À gauche, une carte des environs de la centrale du Bugey et à droite un agrandissement de tous les points de mesure (cercles) sont présentés (remerciements à l'ECL et l'IRSN). Quatre anneaux doubles représentent les tours aéroréfrigérantes. Les 10 stations utilisées dans cette étude, chapitre 3 sont encadrées. Les 3 rejetées par l'algorithme de réduction sont marquées par des croix. Coordonnées Lambert II étendues

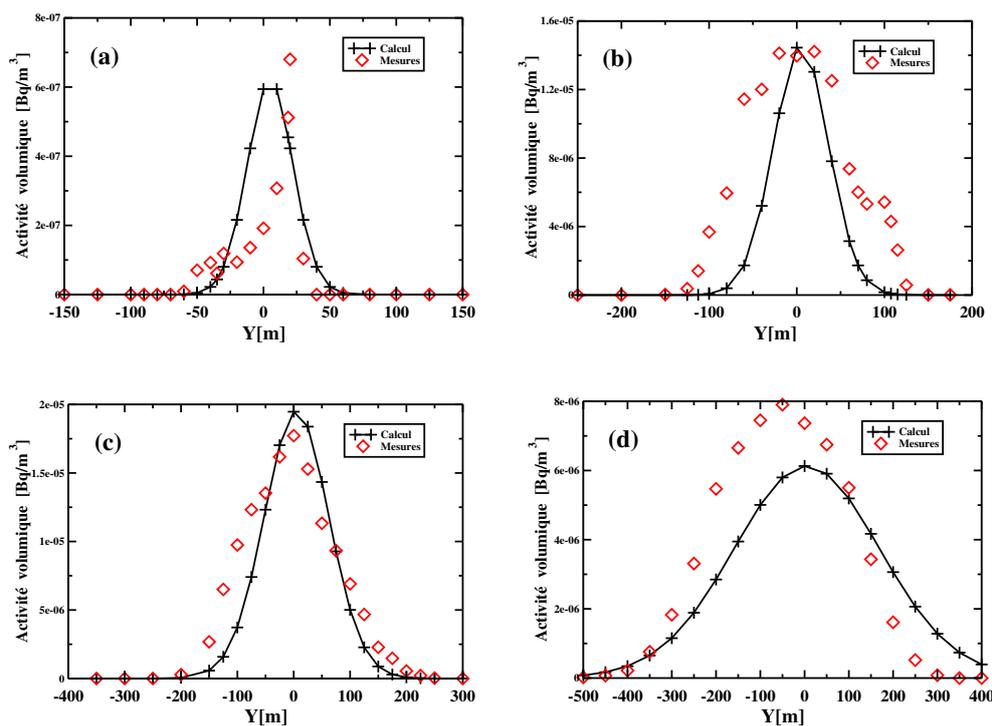


Fig. 2.2.4 – Comparaison modèle-mesures. 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **sud**

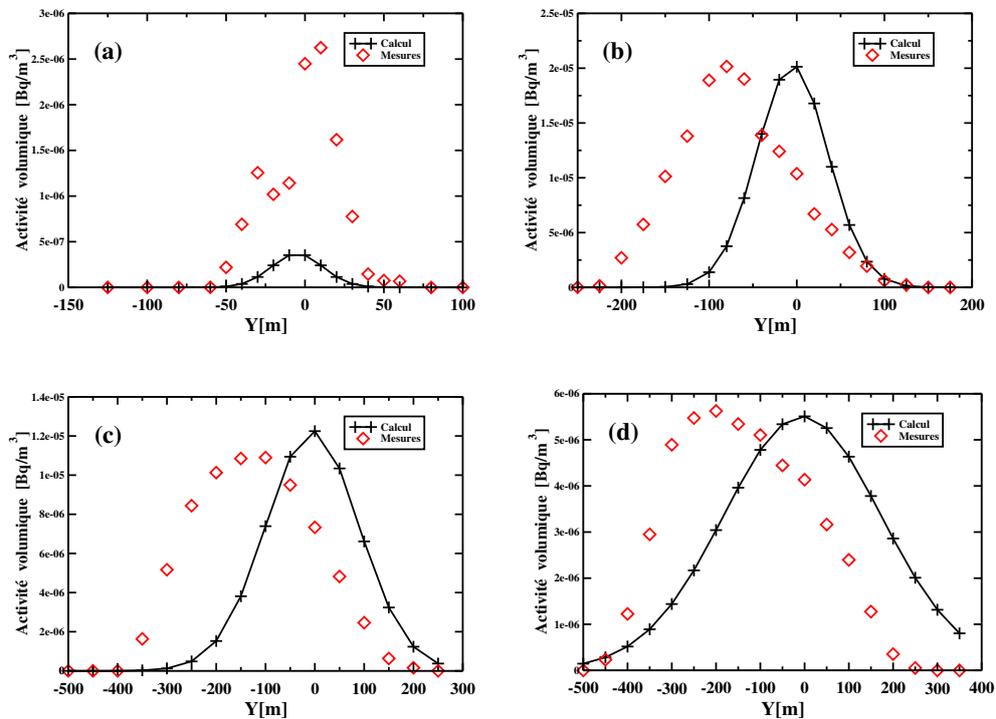


Fig. 2.2.5 – Comparaison modèle-mesures. 80m(a), 450m(b), 1150m(b), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **nord**

2.3 Validation du modèle régional POLAIR3D pour la dispersion de radionucléides

De la même façon que pour le champ proche, le sort de radionucléides à l'échelle régionale est décrit par l'équation (2.1.1). L'équation est résolue numériquement dans le cadre de la plate-forme POLYPHEMUS par le modèle de chimie transport POLAIR3D [Sartelet *et al.*, 2002, Boutahar *et al.*, 2004]. Les processus physiques y sont traités séparément ce qui rend possible l'utilisation de schémas numériques adéquats. Dans ce modèle, l'advection est décrite par le schéma d'ordre trois, Direct Space-Time (DST), avec le limiteur de flux de Koren-Sweby qui a été présenté dans [Verwer *et al.*, 1998a]. Selon les besoins particuliers le schéma peut être rendu linéaire et devenir soit le schéma upwind d'ordre un, soit le DST d'ordre trois. Nous allons utiliser cette première possibilité dans le chapitre 4. La diffusion est résolue par la méthode de Rosenbrock d'ordre deux. Une description des schémas employés par POLAIR3D se trouve dans l'annexe A.1.

Au sein de la couche limite, la diffusion verticale, K_{zz} est décrite par la paramétrisation de Troen et Mahrt [Troen et Mahrt, 1986]. Au-dessus de la couche limite nous utilisons la paramétrisation de Louis [Louis, 1979].

Puisque pour l'expérience dans la soufflerie à l'échelle locale, nous modélisons le comportement d'un traceur inerte, les processus de perte n'ont pas été pris en compte par le modèle à bouffées. Mais la modélisation d'un nuage suite à la catastrophe de Tchernobyl ou le rejet d'Algésiras, que nous aborderons par la suite, exige l'introduction au sein du modèle des processus d'appauvrissement. En effet, dans ces cas il s'agit de la dispersion de radionucléides qui sont des traceurs déposants (voir section 1.4.3). Ils subissent donc des processus de perte comme le dépôt sec, le lessivage et en plus la décroissance radioactive.

2.3.1 Processus de perte

Nous avons déjà parlé dans la section 1.4.4 des processus d'appauvrissement que subissent des radionucléides. Nous décrivons ci-dessous la manière dont ces processus sont modélisés dans POLAIR3D.

Dépôt sec

Nous rappelons qu'il est imposé comme une condition aux limites :

$$(\mathbf{K}\nabla c) \cdot \mathbf{n} = v_d c, \quad (2.3.1)$$

avec la vitesse de dépôt constante dans ces travaux. Bien qu'on ne puisse pas attacher une valeur figée à chacune des espèces radioactives, l'intervalle des valeurs recommandées de v_d est restreint. Les valeurs utilisées dans cette thèse sont présentées dans l'annexe A.3.

Lessivage

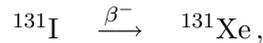
Ce processus est pris en compte en suivant le modèle de Belot, [Belot *et al.*, 1988] :

$$\lambda_{\text{lessiv}} = \alpha A p_0^B + (1 - \alpha) A p_0, \quad (2.3.2)$$

où α est la fraction gazeuse d'un radionucléide modélisé et $(1 - \alpha)$ est une fraction de la matière sous forme des particules. p_0 est une intensité de la pluie, et les valeurs des coefficients préconisées par Belot sont $A = 4.0 \times 10^{-5}$ et $B = 0.6$.

Décroissance radioactive

La demie-vie de ^{131}I est $T_{\frac{1}{2}} = 8.04$ jours et ^{131}Xe , le produit de sa désintégration :



est un isotope stable. La désintégration du parent conduit, donc, à l'élimination de l'élément radioactif d'un nuage. Le ^{137}Cs a le temps de demie-vie $T_{\frac{1}{2}} = 30.174$ ans et il se désintègre selon le schéma :



Puisque le temps de demi-vie du baryum métastable, $^{137\text{m}}\text{Ba}$, est 2.6 minutes et l'isotope ^{137}Ba est stable, alors ici, comme pour ^{131}I , la chaîne de désintégration est limitée à un couple père-fils.

2.3.2 Observables analysées

Les observables associées à un nuage provenant d'un rejet accidentel de traceurs sont différentes de celles utilisées habituellement pour décrire le comportement des polluants diffus. Le nuage d'un traceur est caractérisé par une forme bien définie, distincte de l'air environnant et est d'une relativement courte durée. Les profils de concentration observés dans les stations de mesure sont caractérisés par un ou plusieurs pics qui correspondent au passage du panache. Les observables analysées doivent refléter ces propriétés et le choix des indicateurs statistiques doit être adéquat.

Par conséquent, à côté de la concentration (ou de l'activité volumique pour la dispersion de radionucléides) et de la dose, l'analyse d'un événement de dispersion d'un traceur fait appel également aux notions suivantes :

- le *temps d'arrivée* du nuage qui est un instant indiquant le premier dépassement d'un seuil de détection dans une station de mesure,
- le *temps d'arrivée du maximum* qui reflète l'instant du passage de la concentration maximale,
- la *durée* qui est déclenchée par le dépassement d'un niveau précis de concentration et désigne la durée de ce phénomène.

Remarquons que dans le cas d'un rejet de radionucléides ces observables fournissent de l'information importante qui conditionnerait les contre-mesures à prendre suite à un rejet dans l'atmosphère.

Des nombreux indicateurs statistiques sont utilisés pour analyser ces observables. Leurs définitions peuvent être trouvées dans l'annexe A.2. Ces indicateurs statistiques seront utilisés pour évaluer les simulations du POLAIR3D pour l'expérience ETEX et les rejets accidentels de Tchernobyl et Algésiras dans la suite de ce chapitre.

2.3.3 L'expérience ETEX

Le but de l'expérience

ETEX (European Tracer EXperiment) est l'une des expériences le mieux instrumentées et documentées à l'échelle continentale à ce jour. Elle est née d'une volonté de combler des manquements révélés par l'étude ATMES (Atmospheric Transport Model Evaluation Study). ATMES a eu pour but de tester des capacités de modèles à simuler la dispersion de ^{131}I et ^{137}Cs qui ont été rejetés dans l'atmosphère suite à l'accident de Tchernobyl, section 1.4.1. Une des conclusions de cette étude était que les résultats de simulations du nuage dans la phase post-accidentelle sont meilleurs que les simulations en cas d'une crise quand le temps presse et le stress joue un rôle important. Un exercice qui consisterait en prévisions en temps réel a donc été proposé.

ETEX a été conduite en 1994 par le Centre commun de recherche de la Commission européenne. Elle consiste en deux campagnes de mesure, ETEX-I et ETEX-II, associées à deux rejets différents, dont seulement la première fera l'objet d'étude dans cette thèse. En effet, il est bien connu que le deuxième rejet est accompagné par des mesures qui sont très difficiles à interpréter.

La source, voir section 1.4.2, a été localisée à Monterfil en Bretagne et 340 kg du perfluorométhylcyclohexane (PMCH) ont été rejetés dans l'atmosphère entre le 23 octobre 1600 UTC et le 24 octobre 0350 UTC. Le rejet d'ETEX-I a eu lieu avec le débit pratiquement constant, 7.98 g.s^{-1} , pendant toute sa durée. PMCH a été choisi parce qu'il n'a pas d'effets nocifs. En plus, il est inerte et ne subit pas de processus de perte : dépôt sec ou lessivage. Il a l'avantage d'être caractérisé par un niveau très faible de détection : 0.05 ng.m^{-3} .

168 stations de l'OMM dans 17 pays ont participé à la campagne de mesures. 969 valeurs significativement différentes du niveau de fond ont été rassemblées, ainsi que 2136 mesures qui ne se distinguent pas du fond. D'autres ont été perdues ou simplement n'ont pas été analysées. Ces résultats ont rendu possible la calibration de modèles de dispersion. En particulier, l'exercice de l'intercomparaison ATMES-II entreprise à la suite de l'expérience ETEX a réuni pas moins que 43 participants. D'autre part, des nombreux exemples ont été présentés dans [*Atmospheric Environment*, 1998]. Par ailleurs, ETEX était également au centre d'un symposium organisé à Vienne et consacré à la validation d'une réponse de modèles de transport à grande échelle en cas d'une crise nucléaire, [Nodop, 1997].

Simulation

L'expérience que nous avons acquise en conjonction avec les données publiées sur ETEX, dont certains exemples ont été décrits dans les sections 1.4 et 1.6, nous ont permis de conjecturer les sensibilités de résultats aux données météorologiques (surtout les champs de vent et la diffusivité). Il est vrai que ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) fournit des champs opérationnels ayant la résolution $0.5^\circ \times 0.5^\circ$ mais nous avons opté dans cette étude pour les champs ERA-40. Malgré la résolution plus grossière, $1.125^\circ \times 1.125^\circ$, ils suscitent plus de confiance parce qu'il s'agit des champs analysés. En fait, ils sont fournis avec une fréquence de 3 heures, en alternant des champs analysés et des champs en mode de prévision. Les conditions météorologiques au temps du rejet ont été caractérisées par une dépression centrée au nord-est de l'Écosse. La description du domaine de calcul se trouve dans l'annexe A.3.1.

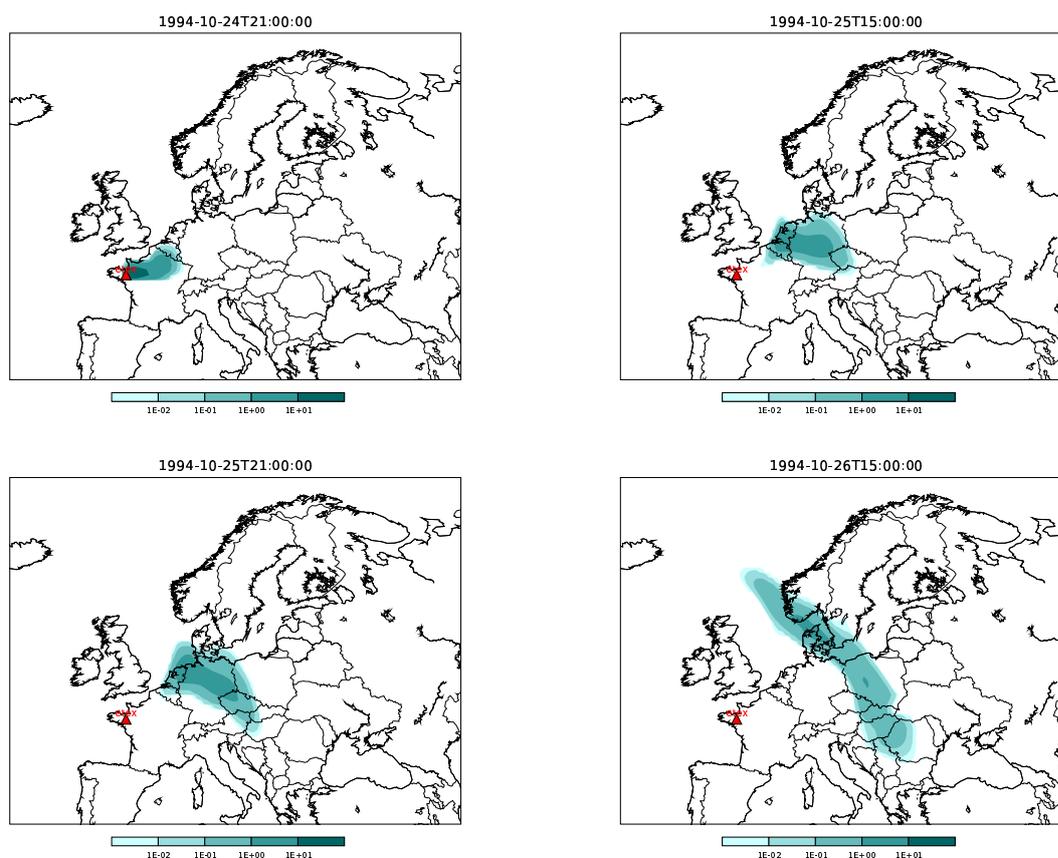


Figure 2.3.1: Concentrations du PMCH en ng.m^{-3} au sol suite au rejet d'ETEX-I. Les cartes montrent la forme du panache à 2100 UTC le 24 octobre (en haut à gauche), à 1500 UTC le 25 octobre (en haut à droite), à 2100 UTC le 25 octobre (en bas à gauche) et à 1500 UTC le 26 octobre

On remarque sur la figure 2.3.1 le départ du nuage vers l'est suite au rejet. Ensuite, entraîné dans un mouvement circulaire autour de la dépression, le panache se déplace vers le nord-est. Sa partie nord est advectée fortement vers la Scandinavie, tandis que la partie sud se déplace vers l'est poussée par des vents faibles à la frontière entre la dépression et un anticyclone centré au nord-est de la partie européenne de la Russie. Ces deux phénomènes influencent l'étirement du panache. Plus tard, la partie sud du nuage est rattrapée par les vents de la dépression et continue à se déplacer vers le nord-est.

Résultats

Parmi des stations qui ont participé à la collecte de mesures, 139 en ont accumulé au moins 11. La validation du modèle s'effectue exclusivement sur des mesures prises par ces stations. Puisqu'il s'agit d'un rejet imitant un rejet accidentel qui a donné suite à un vaste spectre de mesures, la validation d'un modèle met l'accent sur d'autres observables que la concentration. Il s'agit du temps d'arrivée du nuage, la durée du dépassement d'un seuil (0.05 ng.m^{-3} d'après [Brandt, 1998]) et la dose, la concentration maximale et son temps d'arrivée. Notons que la dose est définie comme une somme de concentrations. Des diagrammes de corrélation pour ces observables sont présentés sur la figure 2.3.2 et les valeurs des indicateurs statistiques correspondants se trouvent dans le tableau 2.3.1.

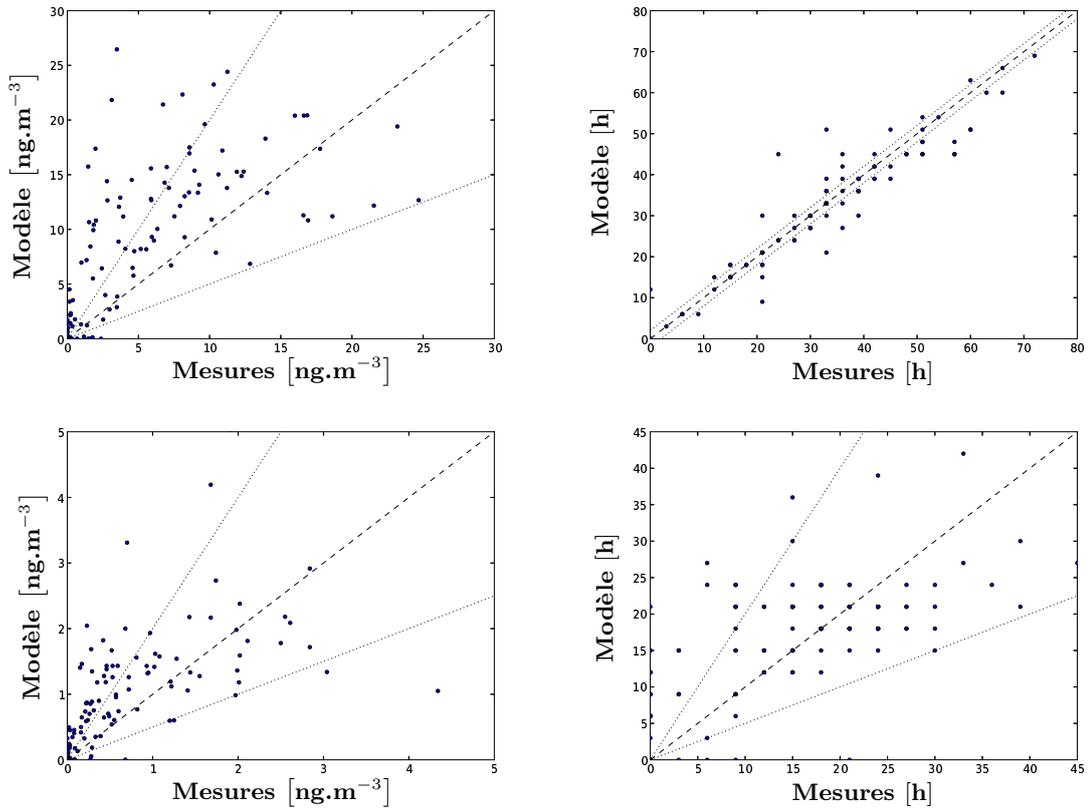


FIG. 2.3.2 – Sur ces diagrammes de corrélation l’axe horizontal correspond à des mesures et l’axe vertical à des prévisions du modèle. Dans la première ligne nous montrons les diagrammes de corrélation pour la dose (à gauche) et le temps d’arrivée du nuage (à droite). Dans la deuxième ligne, à gauche, nous illustrons la concentration maximale et la durée d’un passage du nuage est donnée à droite. Les diagrammes ont été obtenus pour 139 stations qui ont enregistré au moins 11 mesures

Observable \ Indicateur	ρ	FM	NMSE	FB
Dose	0.80	0.32	6.27	0.93
Temps d’arrivée	0.94	0.90	0.13	-0.023
Durée	0.74	0.66	0.54	0.11
Max	0.83	0.37	3.84	0.75
Temps d’arrivée du max	0.58	0.77	0.92	0.15
Concentrations	0.60	0.26	5.00	0.89

TAB. 2.3.1 – Une comparaison des résultats d’une simulation du nuage d’ETEX par POLAIR3D aux données. Les observables analysées sont la dose, le temps d’arrivée du nuage et la durée de dépassement d’un seuil, notamment 0.05 ng.m^{-3} , le maximum et son temps d’arrivée et finalement la concentration. La qualité des résultats est quantifiée à l’aide d’une corrélation ρ , de l’indice de mérite FM, de l’erreur quadratique moyenne normalisée NMSE et du biais fractionnel FB (pour les définitions des indicateurs statistiques voir l’annexe A.2). Les mesures sont celles qui ont été collectées dans 139 stations analysées

2.3.4 L'accident de Tchernobyl

L'accident de Tchernobyl, l'événement le plus grave parmi ceux liés à l'utilisation civile de l'énergie nucléaire, a entraîné la dispersion d'un nuage radioactif à travers tout l'hémisphère nord, voir section 1.4.5.

Terme source

Le terme source de l'accident de Tchernobyl est complexe. Ses estimations ont considérablement évolué, [UNSCEAR, 2000] mais les incertitudes sont toujours importantes. Le lieu d'accident est bien connu - il s'agit du 4^{ème} réacteur de la centrale nucléaire à Tchernobyl, (51°17' N, 30°15' E). Il en est de même pour l'instant du début de rejet, 2123 UTC le 25 avril 1986. Suite à l'explosion, la quantité de la radioactivité émise le premier jour a été plus importante que par la suite du rejet. Elle baissait ensuite au cours du temps pour remonter de nouveau à partir du 2 mai, suite à des hautes températures qui ont accompagné la fusion du cœur de réacteur. L'explosion au début de l'émission a eu aussi pour l'effet la remontée de la matière très haut dans l'atmosphère. À l'exception des gaz nobles et de l'iode qui était également dans l'état gazeux, la matière rejetée était sous forme de particules. L'émission a duré 10 jours, entre le 26 avril (temps local) et le 5 mai 1986, avec des fuites de petites quantités de radioactivité après cette date. En revanche, la composition de la source, la quantité et surtout sa distribution temporelle sont plus incertaines. L'erreur de 50% est évoquée dans [NEA, 2003] pour l'estimation journalière de la quantité de matière relâchée. Mais ce qui est le moins bien connu c'est la distribution verticale.

Toutes ces incertitudes distinguent le terme source de Tchernobyl de celui des expériences ETEX et font comprendre une partie des raisons derrière cet exercice.

L'évolution du nuage radioactif

Nous suivons dans cette étude deux radionucléides : ^{131}I et ^{137}Cs . Selon les rapports [NEA, 2003] et [UNSCEAR, 2000], la totalité de l'iode émise pendant 10 jours vaut 1760×10^{15} Bq et du césium 85×10^{15} Bq. Nous utilisons ces valeurs dans nos simulations. Pour décrire la distribution temporelle nous nous sommes appuyés sur des estimations faites pour ^{131}I et présentées dans les mêmes rapports. La distribution verticale est celle utilisée dans [Brandt *et al.*, 2002]. Ces distributions coïncident pour les deux radionucléides suivis. La description détaillée du terme source, tableau A.3.1, et la configuration du modèle pour cette simulation se trouvent dans l'annexe A.3.2.

Nous commençons par la description de l'évolution du panache du ^{137}Cs illustrée dans les figures 2.3.3 - 2.3.14. Suite au rejet, l'advection du panache d'abord vers l'ouest et ensuite dans la direction nord-ouest est clairement visible dans les figures 2.3.3 et 2.3.4. Le panache passe par la partie nord de l'Ukraine et par la Biélorussie, le pays le plus touché par des retombées de la catastrophe. Le nuage radioactif balaie ensuite la partie nord-est de la Pologne, la Lituanie et la Lettonie pour arriver en Suède le 27 avril, figure 2.3.5.

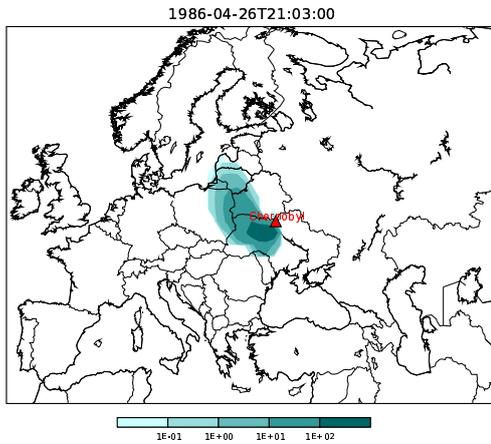


Figure 2.3.3: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 26 avril à 2103 UTC

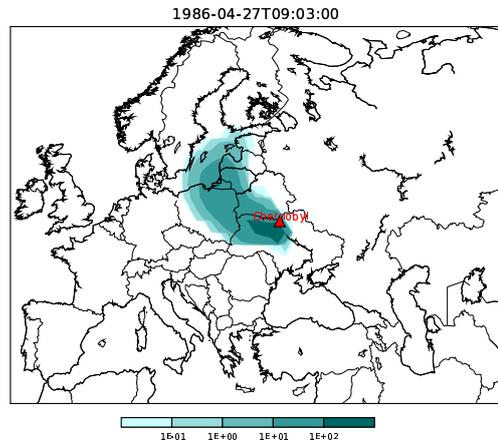


Figure 2.3.4: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 27 avril à 0903 UTC

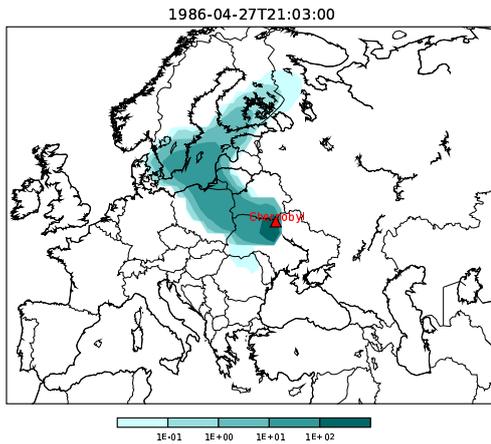


Figure 2.3.5: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 27 avril à 2103 UTC

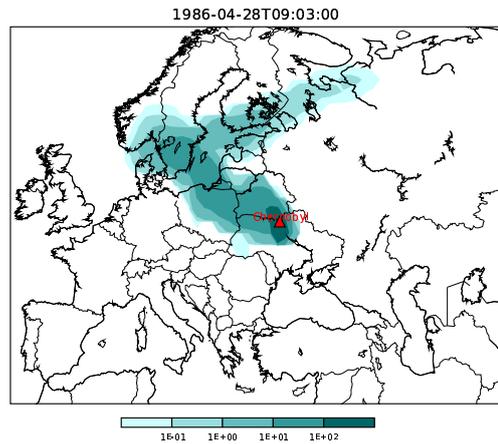


Figure 2.3.6: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 28 avril à 0903 UTC

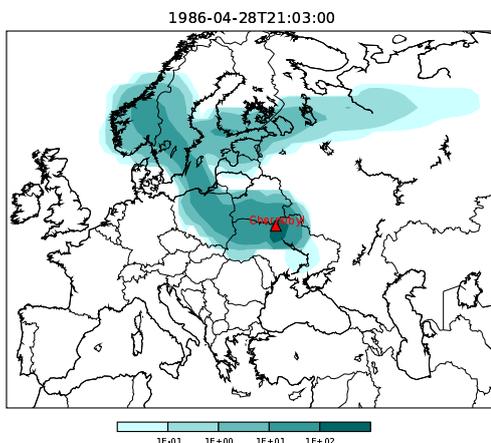


Figure 2.3.7: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 28 avril à 2103 UTC

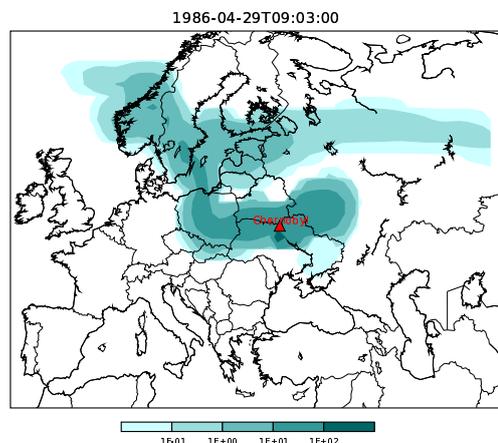


Figure 2.3.8: Concentrations au sol, $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, du ^{137}Cs le 29 avril à 0903 UTC

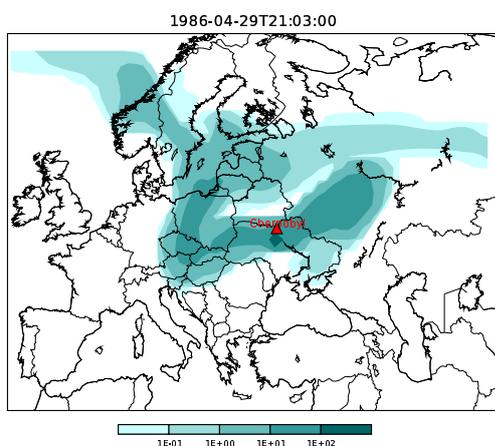


Figure 2.3.9: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 29 avril à 2103 UTC

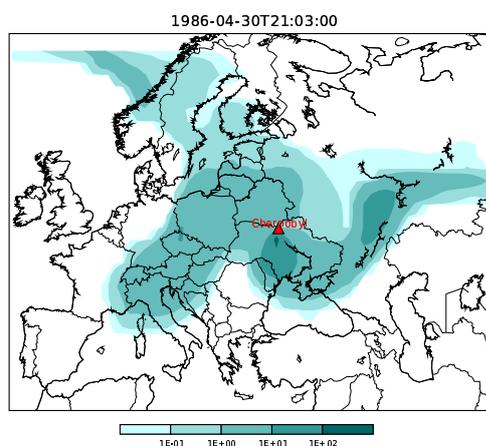


Figure 2.3.10: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 30 avril à 2103 UTC

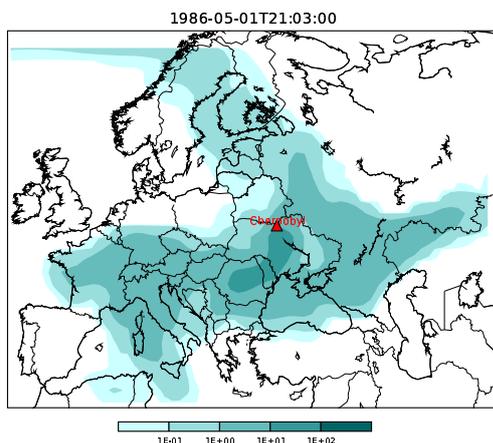


Figure 2.3.11: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 1 mai à 2103 UTC

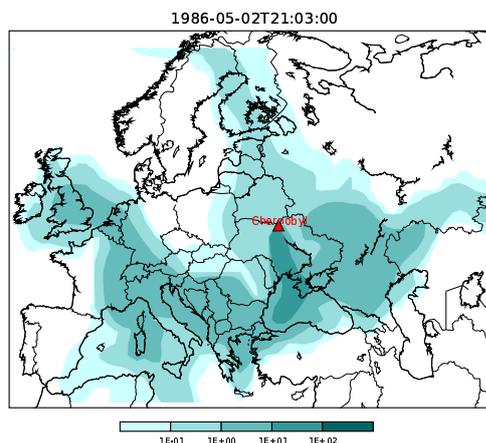


Figure 2.3.12: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 2 mai à 2103 UTC

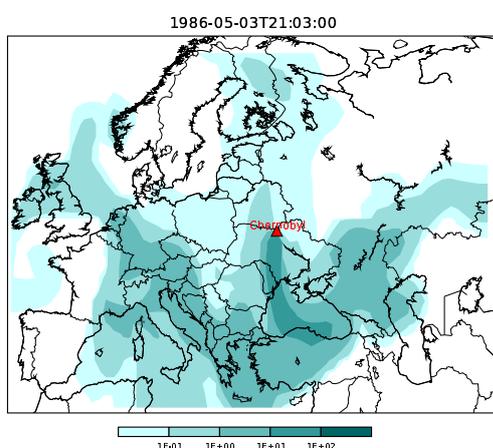


Figure 2.3.13: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 3 mai à 2103 UTC

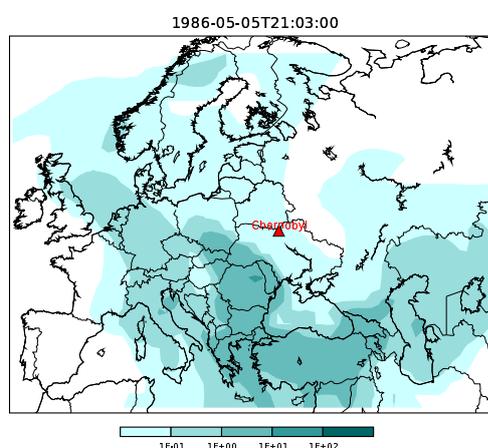


Figure 2.3.14: Concentrations au sol, Bq.m^{-3} , du ^{137}Cs le 5 mai à 2103 UTC

La matière radioactive au-dessus de la Scandinavie s'est retrouvée au sein d'une pluie frontale, [Warner et Harrison, 1993], et par conséquent le lendemain des quantités importantes s'y sont déposées au sol (voir l'étude [Langner *et al.*, 1998] rapportée dans la section 1.4.5). Le départ du nuage vers l'est à partir du 28 avril, figures 2.3.7 et 2.3.8, s'est accentué le 29 et le 30, figures 2.3.9 et 2.3.10. La matière libérée ces jours-là a été transportée au dessus de l'Asie, jusqu'au Japon et l'Amérique du Nord. La matière qui s'est retrouvée en Europe centrale a été entraînée dans un mouvement circulaire autour du centre d'un anticyclone, figure 2.3.10. Ce mouvement suit le sens des aiguilles d'une montre, au début il est donc vers le sud-ouest et ensuite vers l'ouest, figure 2.3.11. En accompagnant le déplacement de l'anticyclone vers l'est, la matière continue à tourner vers le nord et le nord-est, comme montré sur la figure 2.3.13.

Comparaison aux mesures

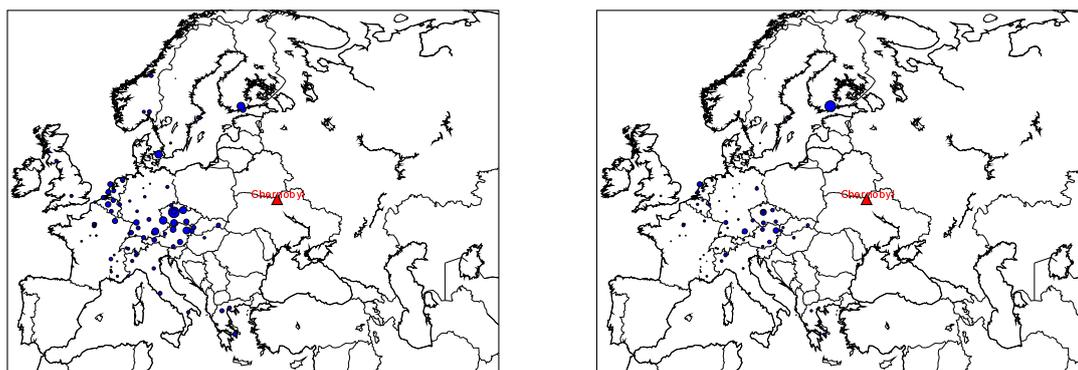


FIG. 2.3.15 – Cartes de stations de mesure pour l'accident de Tchernobyl. À gauche les stations pour ^{137}Cs , à droite celles qui ont mesuré ^{131}I . Le diamètre du disque est proportionnel à la valeur de la mesure la plus importante dans une station donnée. La localisation de la source à Tchernobyl est également indiquée

Les mesures sont celles de la base de données de REM (Radioactivity Environmental Monitoring) du Centre commun de recherche à Ispra en Italie. 1278 activités volumiques du ^{137}Cs et 1333 de l'iode-131 ont été collectées par 88 stations dont 86 communes pour les deux espèces. Une comparaison globale modèle-mesure d'activités volumiques est illustrée par des diagrammes de corrélation, figure 2.3.16. Contrairement à l'expérience ETEX, nous n'analysons pas d'autres observables à cause de la faible résolution temporelle de la majorité des mesures. Sur la figure à gauche on remarque l'absence du biais pour la simulation du nuage du césium. Un meilleur accord pour des mesures plus élevées et dans la majorité des cas une estimation qui reproduit correctement l'ordre de grandeur d'une mesure se remarquent facilement. La figure à droite montre les résultats pour ^{131}I . Un regard attentif permet d'observer que le modèle sur-estime les mesures, le résultat étant également visible dans le tableau 2.3.2.

Espèce	N_{obs}	B [$\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$]	FB	NMSE	FV	FM	ρ
^{131}I	1333	4.27	0.7109	1.397	0.76	0.320	0.449
^{137}Cs	1278	0.1201	0.1212	0.891	-0.20	0.435	0.562

TAB. 2.3.2 – Une comparaison globale modèle-mesures pour des concentrations de ^{131}I et ^{137}Cs enregistrées suite à l'accident de Tchernobyl. Les définitions des indicateurs présentés se trouvent dans l'annexe A.2, page 133

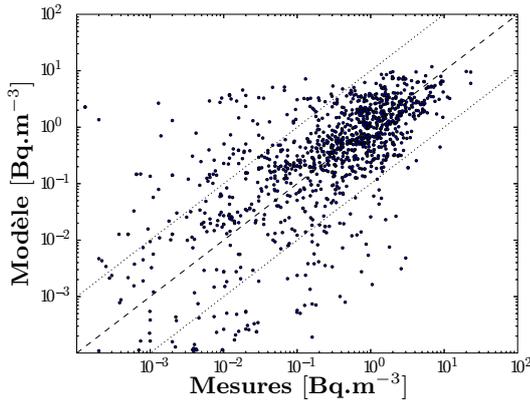


FIG. 2.3.16 – Diagramme de corrélation des activités volumiques du ^{137}Cs à l'échelle logarithmique

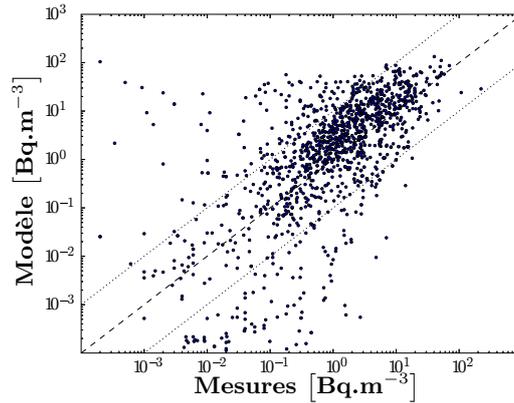


FIG. 2.3.17 – Diagramme de corrélation des activités volumiques du ^{131}I à l'échelle logarithmique

Dans le tableau 2.3.2 nous reportons les statistiques globales pour les deux éléments. Les valeurs de NMSE reflètent des relativement petites déviations entre les résultats de la simulation et les mesures. Des corrélations sont assez élevées pour une modélisation de ce type d'accident. Nous tenons à souligner que ces résultats dépendent fortement du terme source. Pour la distribution temporelle décrite dans [Brandt *et al.*, 2002] la corrélation baisse à 35% pour ^{131}I et à 38.5% pour ^{137}Cs .

2.3.5 Algésiras

Source et mesures

Les circonstances de l'incident d'Algésiras qui a conduit au rejet du ^{137}Cs dans l'atmosphère ont été décrites dans la section 1.2.2. Il est admis que le rejet a eu lieu entre 0100 et 0300 UTC le 30 mai 1998. La quantité estimée de la radioactivité émise se place dans l'intervalle $[8, 80] \text{ Ci}^1$ ou autrement dit $[2.96 \times 10^{11}, 2.96 \times 10^{12}] \text{ Bq}$.

Suite au rejet, 118 activités volumiques moyennes dans l'air ont été collectées. Pour toute mesure le jour du début et de la fin de la période de la collecte nous ont été transmis. Mais, nous n'avons eu aucune précision concernant l'étalement horaire de ces mesures. À cause du manque de l'information précise, nous avons procédé par bon sens et imaginé que toute mesure commence à 1200 UTC le premier jour et se termine à 1200 UTC le dernier jour. Notons que cette hypothèse a été également faite dans [Vogt *et al.*, 1998]. La durée de la prise de mesure varie entre 1 et 14 jours et dans

¹1 Ci (curie) = $3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$

certains endroits cette période s'étend sur l'intervalle de temps commençant avant que le rejet n'ait eu lieu.

Les stations de mesure sont montrées sur la figure 2.3.18. La moitié de mesures provient des stations où seulement une seule valeur a été enregistrée. L'autre moitié a été obtenue dans les endroits où au moins deux mesures ont été rapportées. Les mesures à Ispra, Vercelli, Capo Mele, Trino, Turin et Milan (toutes en Italie, figure 2.3.22) et à Montpellier, Cadarache et Nice, figure 2.3.21, consistent en jusqu'à 5 moyennes journalières et reflètent le profil du panache.

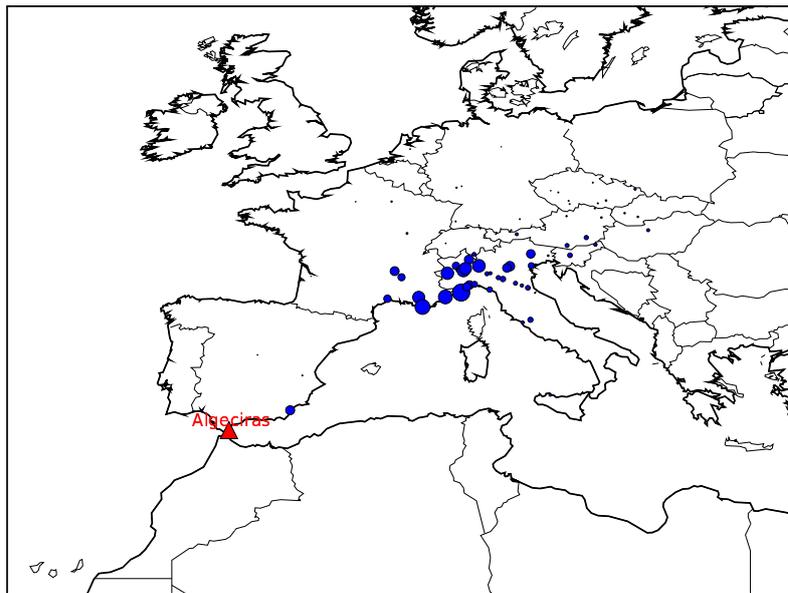


FIG. 2.3.18 – Localisation des stations de mesures pour l'incident à Algésiras. Le diamètre du disque est proportionnel à la valeur de la mesure maximale à une station donnée. Le domaine illustré coïncide avec celui utilisé dans la simulation directe, voir l'annexe A.3.3, et ensuite dans l'inversion, voir chapitre 4. La position de la source à Algésiras au sud de l'Espagne est également indiquée

Discussion des résultats de la simulation

Selon nos connaissances, le premier essai de la simulation des conséquences de l'incident provient de LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) aux États-Unis et est présenté dans [Vogt *et al.*, 1998]. En s'appuyant sur une comparaison modèle-mesures un essai d'établir le temps du rejet et estimer la quantité d'activité émise est discuté dans ce rapport. [Buckley, 1999] et, dans une plus grande mesure, [Baklanov, 1999] se sont focalisés sur l'influence de l'incorporation dans le modèle des processus d'appauvrissement qui passe par le raffinement des schémas du dépôt sec et humide. Le second de ces rapports présente des simulations qui ont été effectuées dans le cadre de l'exercice RTMOD (Real-Time MODEL Evaluation) pour la source de l'incident d'Algésiras, [Graziani *et al.*, 2000].

La description de la configuration du modèle et du domaine de calcul se trouve dans l'annexe A.3.3. Les résultats de la simulation sont illustrés dans la figure 2.3.20. Dans



FIG. 2.3.19 – La vue sur la Baie d'Algésiras. Dans la partie gauche de la figure on remarque la cheminée de l'usine d'Acerinox (à l'époque) qui a fondu la source du ¹³⁷Cs. Le rocher de Gibraltar est visible derrière la cheminée. Source : [http : //www.acerinox.es/acerinox/ingacerinox.nsf](http://www.acerinox.es/acerinox/ingacerinox.nsf)

cette figure nous montrons l'évolution du nuage radioactif émis par la source placée à Algésiras, ($5^{\circ}26'W, 36^{\circ}10'N$), qui a relâché 1.85×10^{12} Bq dans la période 0130 - 0200 UTC le 30 mai 1998. Notons également que la surhauteur de l'émission, liée à la présence d'une cheminée, nous a conduit à placer la source au deuxième niveau du maillage verticale, qui se situe entre 64 et 236 m, figure 2.3.19. Des cartes de l'Europe, figure 2.3.20, montrent la forme du panache toutes les 12 heures. La première illustre la situation le 30 mai 1998 à 1200, 10 heures après la fin du rejet. La dernière se réfère à 0000, le 5 juin 1998.

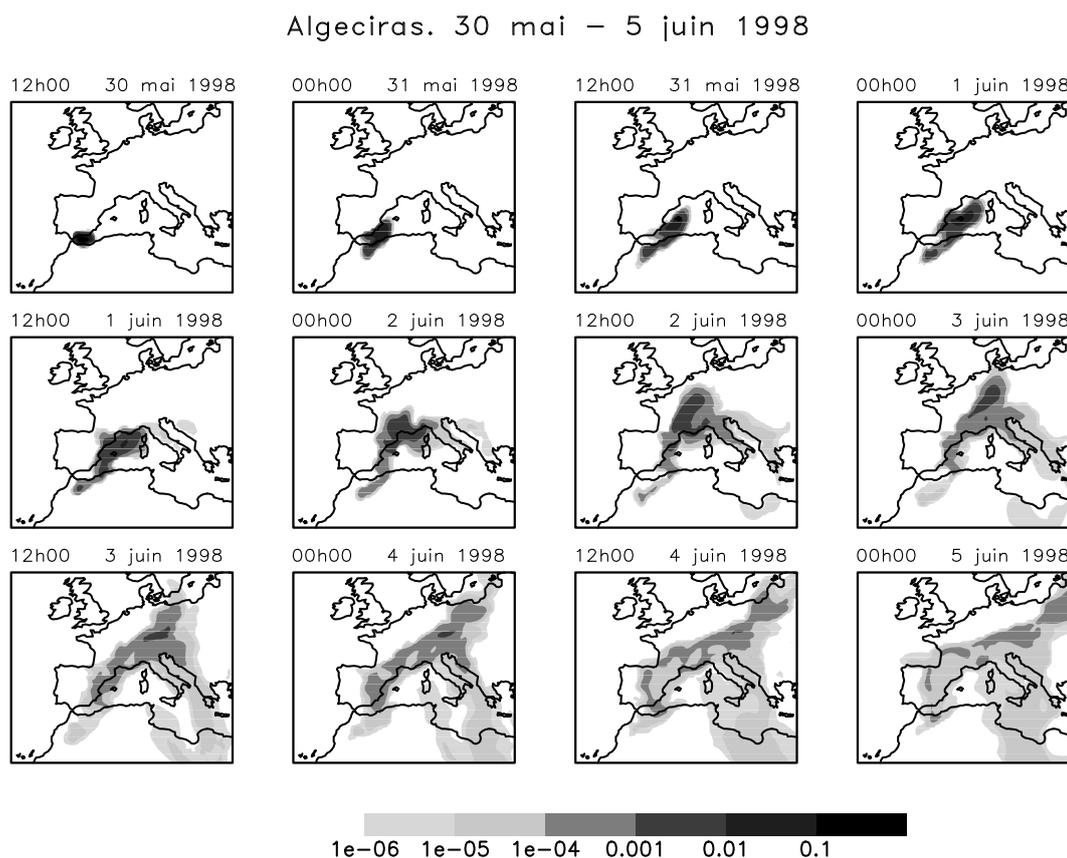


FIG. 2.3.20 – Le développement d'un nuage du ^{137}Cs suite au rejet accidentel à Algésiras, 0130 - 0200 UTC le 30 mai 1998. L'évolution est montrée chaque 12 h à partir de 1200 UTC le 30 mai 1998 donc 10 h après la fin du rejet. L'activité totale émise vaut 1.85×10^{12} Bq et les activités volumiques au sol sont exprimées en Bq.m^{-3}

Dans la première phase après l'accident le panache a été advecté vers l'est au-dessus de la Méditerranée, en laissant la Péninsule Ibérique derrière lui. Ceci explique la rareté des mesures collectées en Espagne. C'est pour cela que l'agence de réglementation nucléaire espagnole n'a pas détecté l'augmentation du niveau de radiation dans ses stations de mesure. L'important écart entre les valeurs mesurées et modélisées à Gibraltar reflète l'erreur modèle au voisinage de la source. C'est une caractéristique intrinsèque d'un modèle eulérien (voir section 1.4). Un meilleur accord modèle-mesure plus loin, le long de la côte espagnol, est néanmoins à noter. Mieux encore, le modèle prédit correctement le temps d'arrivée du nuage au sud de la France, le 2 juin 1998. Le moment

d'arrivée du maximum à Montpellier, Cadarache et Nice est clairement visible sur la figure 2.3.21. Ensuite, le panache se déplace vers la Suisse et l'Italie. En ce qui concerne les stations au Piémont et en Lombardie, les mesures y sont souvent sous-estimées ce qui est parfois lié au décalage entre le panache modélisé et mesuré, voir figure 2.3.22. Vers la fin de la période de simulation, le panache arrive en Europe centrale. Les stations qui s'y trouvent ont été balayées par un nuage dilué et forcément les mesures rassemblées sont plus petites que celles collectées en France ou en Italie. Non seulement ces stations se trouvent loin du point de rejet mais souvent une seule mesure par station, moyennée sur plusieurs jours, y a été prise. À cause de cela la qualité des résultats est difficile à évaluer pour ces stations.

Analyse de moyennes journalières

Nous présentons ici une comparaison entre des observations et des valeurs simulées par POLAIR3D pour quelques stations qui ont enregistré des mesures suite au rejet d'Al-gésiras. Parmi 118 mesures nous avons décidé d'illustrer exclusivement des moyennes journalières et ceci pour les stations qui ont enregistré au moins deux mesures de ce type. Ces stations se trouvent au sud de la France et au nord de l'Italie, dans des endroits où les plus grandes valeurs d'activité volumique ont été mesurées.

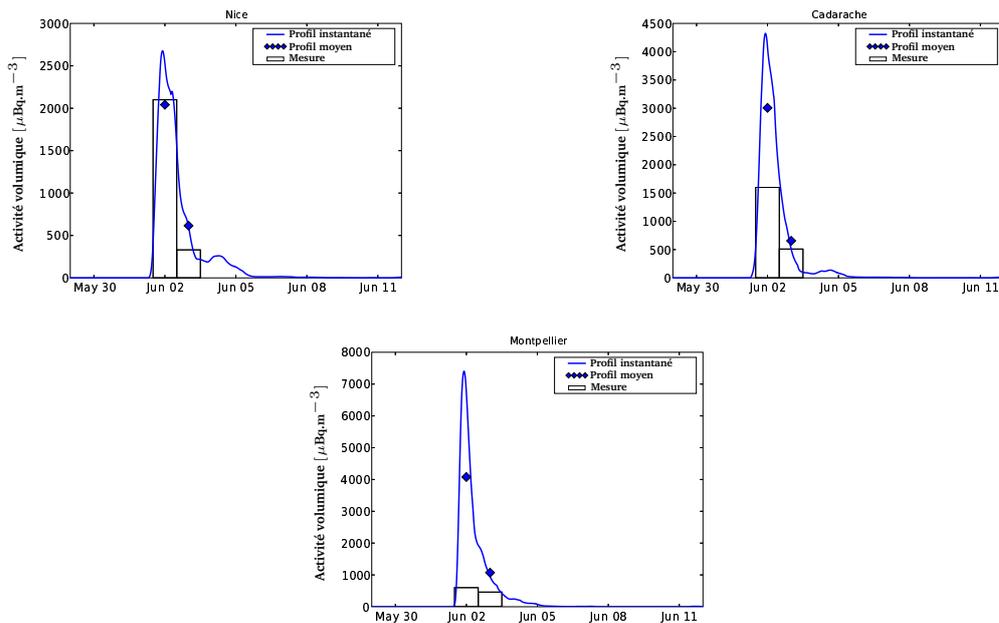


FIG. 2.3.21 – Profils d'activité volumique exprimée en $\mu\text{Bq.m}^{-3}$ à Nice, Cadarache et Montpellier. Le profil simulé instantané est dessiné par la ligne pleine. Des losanges représentent le profil moyen en correspondance avec les mesures journalières. Ces dernières sont illustrées avec des rectangles

À Nice, Cadarache et Montpellier, figure 2.3.21, le profil temporel s'accorde bien avec celui qui a été mesuré. Les valeurs sont sur-estimées d'un facteur 2 pour Cadarache et même 4 pour Montpellier. Pour Ispra, un site italien avec le plus grand nombre des moyennes journalières, le profil temporel du nuage passant a été reproduit correctement, figure 2.3.22. Il s'agit à la fois du temps de passage et des valeurs mesurées. L'accord est moins bon à Capo Mele et à Vercelli et le profil passe complètement à côté de mesures

à Trino, figure 2.3.22 sans que la raison de ce fait nous soit connue. On pourrait éventuellement imaginer un phénomène local d'emprisonnement du nuage dans un endroit entouré par des montagnes. On pourrait également suspecter une erreur dans les dates associées à ces mesures. En effet, Trino se situe seulement une vingtaine de kilomètres de Vercelli et à mi-chemin entre Turin et Milan. Pourtant les mesures enregistrées sont décalées vers des temps ultérieurs. Mais nous n'avons bien évidemment aucune preuve que ceci était le cas.

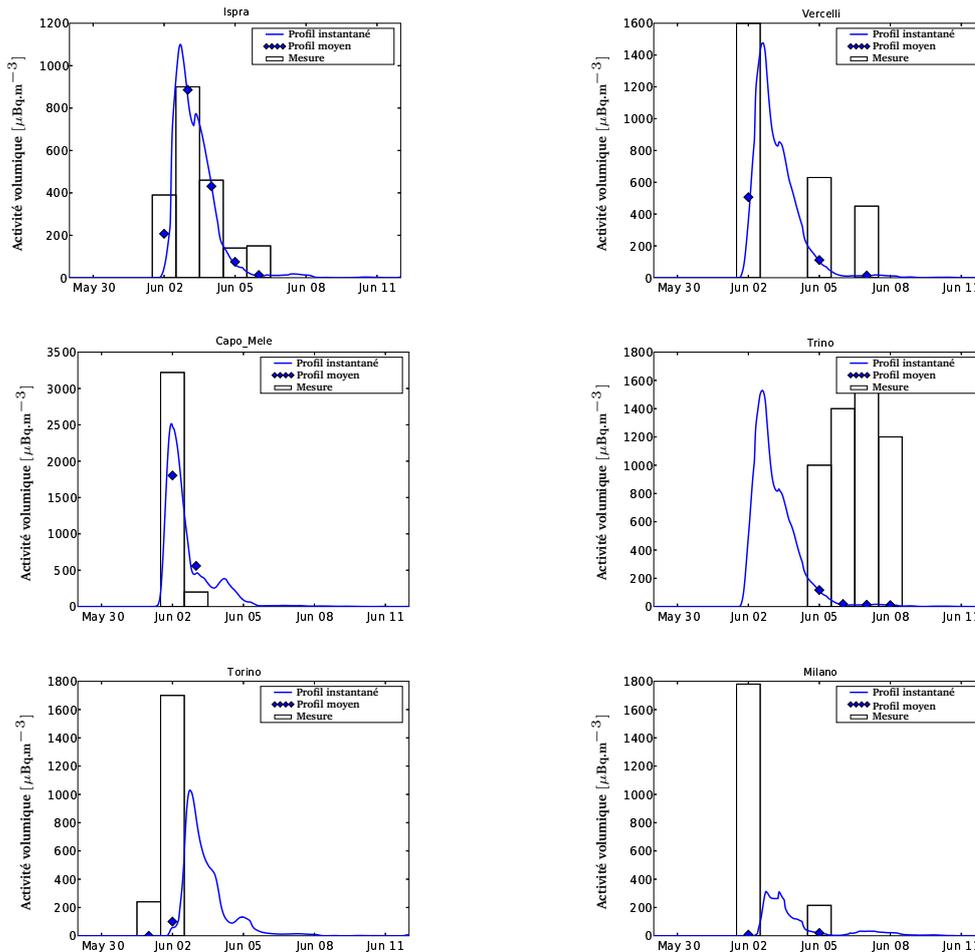


FIG. 2.3.22 – Illustration des profils d'activité volumique exprimés en $\mu\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$ dans certaines stations italiennes. Les rectangles représentent les mesures. La profil instantané est désigné par la ligne pleine et des losanges correspondent aux moyennes journalières modélisées. Les stations illustrées sont localisées à Ispra, Vercelli, Capo Mele, Trino, Turin et Milan

Sur la figure 2.3.23 nous illustrons une correspondance globale entre des concentrations dans l'air simulées et mesurées, pour toutes les 118 mesures dont nous disposons. La majorité de points se situe entre les deux lignes en pointillé. Ce fait implique que les prévisions de modèle s'accordent aux mesures d'un facteur qui ne dépasse pas un ordre de grandeur. Mais il y a des stations pour lesquelles ces écarts sont plus élevés. On remarque que les points sont distribués uniformément des deux côtés de la diagonale. Ce fait est mesuré par des quantités comme le biais, le biais fractionnel et surtout le biais géométrique, qui est adapté aux cas de comparaison de deux suites caractérisées

par des écarts importants.

Bien que la distribution des points autour de la diagonale est assez uniforme, ces écarts importants sont reflétés par des valeurs plus élevées des indicateurs reposant sur la variance comme le NMSE, le FV et la GV, voir l'annexe A.2. Il est vrai que la corrélation de 20% est assez faible mais il faut noter ici qu'aucune sélection de mesures n'a été effectuée.

La simulation que nous venons de discuter repose sur l'utilisation de champs opérationnels de l'ECMWF, voir l'annexe A.3.3. Pourtant, précisément à cause du fait qu'ils ont été réanalysés et donc couplés aux mesures des états d'atmosphère, les champs ERA-40 devraient donner des meilleurs résultats. Dans le cas de cette simulation il s'avère qu'une comparaison entre les deux types de champs météorologiques, tableau 2.3.3, penche fortement en faveur des champs opérationnels.

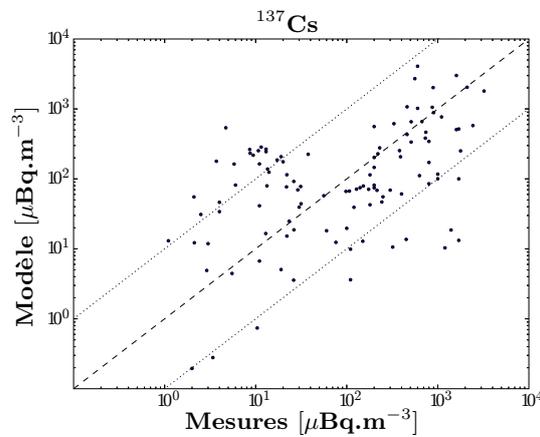


FIG. 2.3.23 – Comparaison modèle-mesures à l'échelle logarithmique

Indicateur	ERA-40	Opér
B $[\mu\text{Bq.m}^{-3}]$	-116.2	32.85
FB	-0.38	0.09
MG	4.34	1.55
NMSE	3.40	2.24
FV	1.60	1.30
VG ¹	203.6	53.1
ρ	-0.02	0.19
FM	0.11	0.29

TAB. 2.3.3 – Comparaison modèle-mesures pour le rejet d'Algésiras. Les indicateurs statistiques servent à évaluer la qualité d'une simulation reposant sur les champs ERA-40 et les champs opérationnels. À cause d'écarts importants entre les valeurs mesurées et modélisées, le biais géométrique et la variance géométrique ont été inclus dans l'analyse. Tous les indicateurs ont été calculés pour 118 mesures. La seule exception étant la variance géométrique qui repose sur 108 mesures pour lesquelles la prévision du modèle dépasse $1 \mu\text{Bq.m}^{-3}$

¹108 mesures

2.4 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre des simulations effectuées avec deux modèles de dispersion à deux échelles différentes. Leur performance a été évaluée sur des jeux de données provenant de rejets contrôlés et de rejets accidentels.

Le modèle à bouffées de l'IRSN/ECL, PX0.1, décrivant la dispersion en champ proche a été confronté aux données de la soufflerie. La qualité de ces données nous permet de conclure que l'écart entre une mesure et une prévision de modèle correspondante est due à l'erreur modèle. Pour les distances par rapport à la source dépassant 500 m, l'erreur modèle est limitée et se résume principalement à un décalage du profil modélisé par rapport aux profils mesurés. Ce décalage, ainsi que l'erreur modèle plus importante au voisinage de la source sont dus à la présence d'obstacles, principalement des tours aéroréfrigérantes. À ce stade du développement de PX0.1 ce fait n'est pas pris en compte par le modèle.

À l'échelle continentale POLAIR3D prévoit correctement les mesures suite au rejet contrôlé d'ETEX-I. Mais les résultats se dégradent quand on aborde la simulation de vrais rejets accidentels. Pour ces derniers la distribution, la fréquence et la qualité de mesures est inférieure à celles disponibles pour des rejets contrôlés. En plus, le terme source qui a une grande influence sur les prévisions de modèle est mal connu. La modélisation souffre de la connaissance limitée des champs météorologiques, du manque de l'information sur l'état physique des matériaux émis ou de la modélisation de transformations physico-chimiques subies par de radionucléides. Raffiner davantage la modélisation est un vrai défi à cause de la complexité des processus qui devraient être pris en compte. En plus, raffiner ne garantit pas nécessairement l'amélioration des résultats finaux.

Pour contourner une partie de difficultés liées aux limitations de la modélisation, nous allons nous appuyer sur des opportunités offertes par l'assimilation de données. Le couplage entre le modèle de dispersion en champ proche, PX0.1, et les mesures de la soufflerie aura pour but de modifier des paramètres de forçage pour que les prévisions s'accordent mieux aux mesures, chapitre 3. L'inversion du terme source sur la base de mesures de la soufflerie fera également l'objet d'études. Par la suite, l'inversion d'une source à l'échelle continentale sera abordée sur la base de mesures synthétiques. Puis, les vraies mesures remplaceront celles générées par POLAIR3D. La performance du modèle est-elle de qualité suffisante pour que l'inversion d'une vraie source du rejet soit possible ? La réponse à cette question viendra dans le chapitre 4.

La validation de la plate-forme POLYPHEMUS employée avec le modèle de chimie-transport POLAIR3D sur les données d'ETEX, de Tchernobyl et d'Algésiras fait l'objet d'un manuscrit soumis à l'Atmospheric Environment, [Quélo et al., 2006], "Validation of the POLYPHEMUS platform : the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases".

Chapitre 3

Inversion de sources à l'échelle locale. Assimilation de mesures en soufflerie

Motivation. Le centre de crise de l'IRSN a pour but de fournir l'information sur le niveau de contamination radioactive en cas d'un rejet des radionucléides dans l'atmosphère. Le fonctionnement des centrales qui composent le parc nucléaire français étant surveillé, les indications d'un accident potentiel surviennent en général avant que le rejet radioactif n'ait lieu. Cet intervalle de temps permet de prendre des décisions visant la restriction des conséquences de la présence des niveaux élevés de radioactivité dans l'environnement. Il s'agit de contre-mesures allant de la distribution de suppléments d'iode jusqu'à l'évacuation d'une population. Dans le but d'évaluer des conséquences, un modèle de dispersion atmosphérique doit être capable de fournir des résultats fiables rapidement. Mais le rôle du modèle ne s'arrête pas avec la prévision. Quand le rejet a déjà eu lieu et des mesures de radioactivité ont été rassemblées, le modèle peut être couplé aux mesures dans le procédé de l'assimilation de données. Il va être utilisé dans le mode inverse pour fournir les estimations du terme source et raffiner d'autres paramètres d'entrée. Dès qu'on dispose des paramètres optimisés, la nouvelle exécution du modèle conduira aux meilleures prévisions. Les résultats présentés dans ce chapitre se focalisent sur cette approche. Mais à cause de la nature de données rassemblées dans la soufflerie, nous nous restreignons à la première étape, notamment la modélisation inverse. Les travaux présentés par la suite sont une continuation d'études menées dans [Quélo *et al.*, 2005] avec un modèle du panache gaussien sur des mesures synthétiques.

3.1 Méthode variationnelle d'inversion

La méthode variationnelle d'assimilation de données permet de corriger des prévisions grâce à l'incorporation dans le modèle des informations contenues dans les mesures. La modélisation inverse, un cas intermédiaire de l'assimilation de données, permet d'améliorer la connaissance des valeurs de paramètres d'entrée du modèle. Les valeurs améliorées sont d'autant plus proches des vraies valeurs que le modèle donne une meilleure description du processus de dispersion et l'erreur de mesure plus petite.

On considère que les profils illustrés dans la section 2.2.3 s'accordent suffisamment

bien pour qu'on puisse espérer pouvoir retrouver le débit de la vraie source en s'appuyant sur l'information fournie par des mesures. Néanmoins, cet accord est loin d'être parfait. Pour l'expérience dans la soufflerie l'erreur de mesure des concentrations est supposée négligeable (voir section 2.2.2) et en plus nous connaissons bien des paramètres d'entrée du modèle à bouffées (voir l'annexe B.1). Par conséquent, pour évoquer des écarts modèle-mesures qui se résument aux erreurs d'observation, nous utilisons la notion d'erreur modèle. C'est la volonté de compenser l'erreur modèle qui nous conduit à effectuer d'autres types d'expériences d'optimisation.

La comparaison des sorties du modèle aux données suggère donc deux problèmes majeurs que l'on traitera dans la suite.

- Premièrement, nous considérons le débit de la source fourni par la soufflerie $\dot{q} = 1 \text{ Bq.s}^{-1}$ comme la vraie valeur. Le rôle de la modélisation inverse dans ce cas est de la reproduire en partant d'une valeur initiale arbitraire. Cette configuration imite la situation réelle dans laquelle le débit de la source est biaisé par une erreur possible de diagnostic de l'incident. Nous jugeons de la performance de l'algorithme selon l'écart entre la valeur optimisée et la valeur fournie par la soufflerie.
- Étant convaincus que c'est la faible qualité de la modélisation du champ de vent qui est responsable en grande partie de l'erreur modèle, nous continuons d'inverser la source en cherchant en même temps la possibilité d'ajuster les profils calculés et mesurés. En effet, la soufflerie nous fournit la vraie valeur des deux composantes horizontales de la vitesse du vent, u et v , mais en un seul point du domaine. Forcément, cette valeur ne rend pas compte des variations locales de la vitesse au sein du domaine dont l'origine est la présence des tours aéroréfrigérantes et, à moindre degré, d'autres bâtiments. Elle n'est pas nécessairement non plus la valeur qui donne la meilleure description moyenne du phénomène. Nous avons donc supposé que les valeurs $u = 3.0 \text{ m.s}^{-1}$ et $v = 0 \text{ m.s}^{-1}$ provenant de la soufflerie ne sont pas exactement celles qui décrivent le mieux le comportement du panache. Dans ce deuxième cas le but de la modélisation inverse n'est pas de reproduire au mieux les valeurs de la soufflerie mais de les modifier afin de réduire l'influence de l'erreur modèle. Nous jugeons la performance de l'algorithme selon la réduction d'un écart entre les sorties du modèle direct et les mesures, quantifié sur toutes les mesures.

Ensuite, toujours dans le but de diminuer l'influence de l'erreur modèle, nous ajoutons à l'ensemble des variables optimisées des coefficients paramétrisant la turbulence. Ces mêmes critères seront utilisés pour évaluer l'optimisation des valeurs par défaut des coefficients du modèle de Doury, introduits dans la section 2.2.1.

Autrement dit, nous nous posons deux objectifs différents en espérant qu'ils soient compatibles. Dans un premier temps, l'assimilation de données est utilisée pour inverser le débit de la source. Dans un deuxième temps nous employons cette technique pour altérer l'écoulement et éventuellement des paramètres de la turbulence et, par conséquent, approcher le modèle aux mesures.

3.1.1 Fonction coût

Pour effectuer la modélisation inverse, on construit une quantité mesurant l'écart ou la distance entre les sorties du modèle et les mesures. Cet écart provient de l'en-

semble des erreurs commises dans les processus de modélisation et observation. Dans le cadre général (voir chapitre 1) l'imprécision des connaissances des paramètres d'entrée, l'erreur modèle, l'erreur de discrétisation ainsi que l'erreur d'observation et de mesure sont responsables de cet écart. Dans une situation accidentelle il est difficile d'estimer des valeurs de certains paramètres d'entrée. Il est d'autant plus difficile d'attribuer un niveau de confiance à ces valeurs. Par conséquent on prive J du terme d'ébauche.

La fonction coût, notée J ici, mesure l'écart entre des mesures μ_i et l'activité χ_i calculée dans chaque point du réseau de mesure selon :

$$J = \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \frac{1}{2} \frac{(\chi_i(\dot{q}, u, v, A_h^1, A_h^2) - \mu_i)^2}{(s_{o,i})^2}. \quad (3.1.1)$$

Des activités volumiques modélisées proviennent du modèle à bouffées, équation (2.2.5), paramétrisé par le débit de la source, le champ du vent et des paramètres de turbulence. Par conséquent, dans le cadre de l'assimilation de données, le modèle à bouffées joue le rôle de l'opérateur d'observation noté habituellement H , voir section 1.5. $s_{o,i}$ est donc l'erreur d'observation qui joue le rôle du facteur de pondération.

Le minimum de la fonction coût est obtenu à l'aide d'un algorithme minimisant L-BFGS-B, [Byrd *et al.*, 1995]. À chaque itération l'algorithme exige la valeur de la fonction coût et sa dérivée par rapport à tout paramètre optimisé. La dérivée par rapport au champ du vent implique la nécessité de dériver par rapport à ses composantes en position du centre de masse de toute bouffée et à chaque pas de temps. Le nombre des paramètres optimisés est élevé tandis que le nombre des mesures est faible. C'est pour cela que, dans le but de calculer la dérivée, on fait appel au mode adjoint et non pas au tangent linéaire. Le mode adjoint part de l'espace d'arrivée de J , \mathbb{R} , et aboutit dans l'espace des paramètres. Dans ce cas, une seule exécution du gradient de J suffit pour récupérer toutes ses composantes, voir l'annexe B.2.1. Le modèle linéaire tangent employé dans ces circonstances aurait exigé autant d'exécutions que le nombre des paramètres.

3.1.2 Construction de l'adjoint

L'adjoint a été dérivé à l'aide du différenciateur automatique Odyssée qui exige que le cœur du code soit écrit en Fortran77, [Faure et Papegay, 1998]. Pour cela, pX0.1 le modèle gaussien développé par l'IRSN et l'ECL contient un cœur écrit en Fortran, fondu au sein d'une structure externe programmée en C. Par conséquent, le code adjoint contient également des routines écrites en Fortran77 qui ont été jointes entre elles par une structure du code en C. Les détails de ces opérations sont expliqués dans l'annexe B.2.2.

3.2 Résultats

Pour chaque direction du vent nous avons choisi 10 stations de mesure au sein du panache contaminé. Les mesures rassemblées dans la soufflerie ont été déjà décrites dans le chapitre 2 et leur localisation illustrée dans la figure 2.2.3 qui s'y trouve également.

Avant de passer aux résultats d'inversions sur des mesures dans la soufflerie, nous soulignons que tous les algorithmes ont été testés préalablement sur des mesures synthétiques.

3.2.1 Modélisation inverse de l'émission

Si nous nous plaçons au voisinage d'une source accidentelle (une centrale), alors sa localisation est forcément connue. Le vrai enjeu est donc de retrouver son profil temporel, ce qui pour l'expérience dans la soufflerie revient à inverser son débit. Imaginons maintenant que nous faisons face à un vrai accident. Nous disposons probablement d'une première estimation qui peut n'être plus qu'une supposition. Pour refléter cette première estimation mal connue, nous reportons dans l'algorithme une valeur initiale arbitraire, différente de la valeur q^t mesurée dans la soufflerie.

Le minimum de l'écart J , (3.1.1), correspond à la valeur améliorée du débit de la source, q^* . Cette valeur là devrait être comparée à la vraie valeur q^t . Les résultats d'inversion sont montrés dans l'annexe B.3, tableau B.3.1, page 150.

Nous remarquons en regardant les résultats que la sous-estimation initiale du débit a été réduite à un écart inférieur à 2% pour le vent du sud et à 12% pour le vent du nord et ceci malgré le décalage important des profils modélisés par rapport aux profils mesurés dans ce deuxième cas. On peut considérer le résultat pour le vent du sud comme très satisfaisant. L'amélioration de la valeur de q est moindre pour le vent du nord mais dans ce cas aussi l'optimisation rapproche significativement la valeur initiale de la vraie valeur.

3.2.2 Estimation des paramètres et validation sur les profils

La connaissance du terme source est cruciale pour pouvoir bien prévoir les conséquences de la contamination. Mais, comme mentionnée déjà, il y a d'autres paramètres qui déterminent la qualité de cette prévision. Parmi eux, il y a sans doute le champ de vent qui contrôle la distribution spatiale du nuage de polluant. Puisque l'expérience a eu lieu dans des conditions stationnaires et les effets dus à l'orographie ont été négligés, le champ de vent vu par le modèle est stationnaire et homogène. Il est caractérisé par deux composantes horizontales mesurées en aval du point source qui ne conduisent pas nécessairement aux meilleures estimations du modèle. Ce fait est responsable de l'extension de l'ensemble des paramètres optimisés par deux composantes horizontales de la vitesse du vent. L'autre maillon faible de la modélisation est la paramétrisation de la turbulence. On espère la raffiner grâce à l'assimilation de données et par conséquent encore mieux accorder les profils. Pour cela, dans un deuxième temps, des paramètres de la turbulence seront ajoutés à l'ensemble précédent.

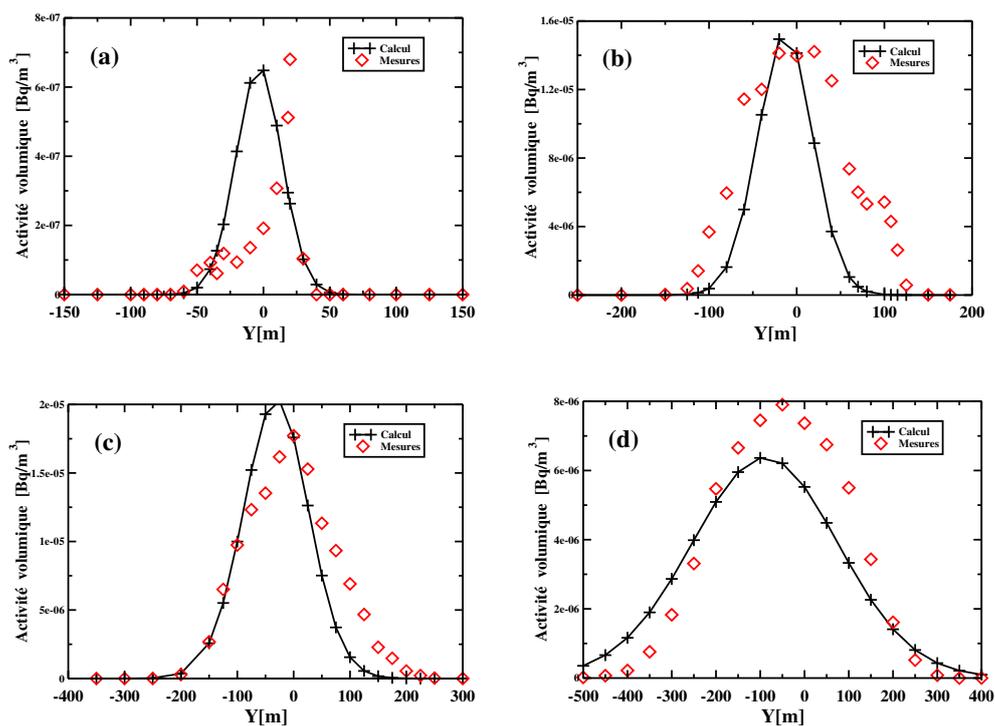


FIG. 3.2.1 – Comparaison modèle-mesures effectuée pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* et v^* (voir tableau B.3.2, page 150). 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **sud**

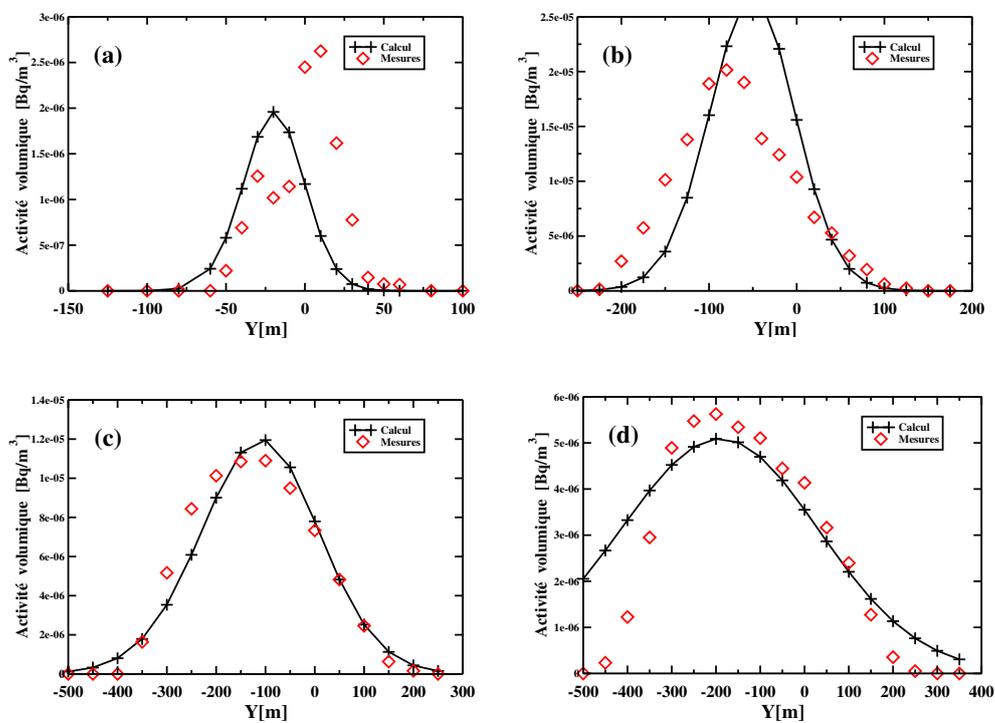


FIG. 3.2.2 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* et v^* (voir tableau B.3.2, page 150). 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **nord**

Composantes horizontales de la vitesse du vent

Nous passons donc au deuxième mode d'utilisation de la modélisation inverse. Il s'agit de l'appliquer pour modifier la vitesse du vent provenant de la soufflerie dans le but d'améliorer un accord entre les activités volumiques mesurées et modélisées. En parallèle, il est nécessaire que la modélisation inverse continue de rapprocher la valeur initiale du débit de la valeur de la soufflerie.

Nous nous plaçons dans une situation réelle où des valeurs des paramètres biaisées par l'erreur de mesure seront disponibles. Pour refléter l'inexactitude de leur connaissance dans le cas d'un accident, les valeurs initiales des vitesses u et v étaient différentes de celles mesurées dans la soufflerie.

Nous proposons de vérifier la qualité de l'optimisation en faisant une comparaison entre le débit optimisé et le vrai débit. Mais au lieu de se concentrer sur la comparaison des vitesses nous proposons de regarder la valeur de la fonction coût, équation (3.1.1). En fait, la fonction coût calculée sur toutes les mesures quantifie la capacité de prédiction de ces mesures par le modèle. Nous regardons donc si la valeur obtenue avec des valeurs des paramètres déterminées par l'optimisation, $J(\dot{q}^*, u^*, v^*)$, diminue par rapport à la valeur obtenue avec les valeurs initiales des paramètres d'entrée du modèle, $J(\dot{q}^{\text{init}}, u^{\text{init}}, v^{\text{init}})$.

Les résultats d'optimisation de ce trois paramètres sont présentés dans l'annexe B.3 dans le tableau B.3.2, 150. Pour le vent du nord, l'optimisation de la vitesse du vent permet d'améliorer l'accord des profils se qui se remarque en comparant la figure 3.2.2(c) avec la figure 2.2.5(c). En plus ceci a conduit à une meilleure inversion du débit de la source que dans le cas d'optimisation d'une seule variable, comparer les tableaux B.3.2 et B.3.1, page 150. En revanche, pour le vent du sud le débit optimisé a été légèrement détérioré par rapport aux résultats pour une seule variable. Les profils qui résultent de cette optimisation ont été déplacés dans un moindre degré que dans le cas précédent, figure 3.2.1(c) à comparer avec figure 2.2.4(c), en conformité avec la plus petite valeur de v^* que pour le vent du nord.

Paramètres de la turbulence

Les deux premières valeurs d'un coefficient paramétrisant la turbulence qui est défini par la formule (2.2.3) et dont les valeurs peuvent être retrouvées dans l'annexe B.1.3, tableau B.1.1, page 140, définies sont ajoutées à l'ensemble des paramètres optimisés. Cet ensemble contient maintenant $(\dot{q}, u, v, A_h^1, A_h^2)$. Contrairement à l'approche suivie jusqu'à présent, nous prenons des valeurs standard des coefficients A_h comme valeurs initiales reportées au processus d'optimisation. Pour les 3 autres paramètres nous continuons à introduire l'erreur par rapport à la valeur mesurée dans la soufflerie.

En analysant les figures 3.2.3 et 3.2.4, on remarque que l'optimisation de ces 5 paramètres permet d'obtenir un très bon accord entre mesures et profils modélisés. L'optimisation fournit les meilleurs résultats et l'inversion quasiment parfaite du débit de la source pour le vent du nord (voir le tableau B.3.4, page 150). Remarquons, tableaux B.3.3 et B.3.5, pages 150 et 151, que le rapport entre la fonction coût calculée sur toutes les mesures de la soufflerie pour les valeurs initiales et optimisées a été divisé par deux entre le cas d'optimisation sans et avec les paramètres de la turbulence.

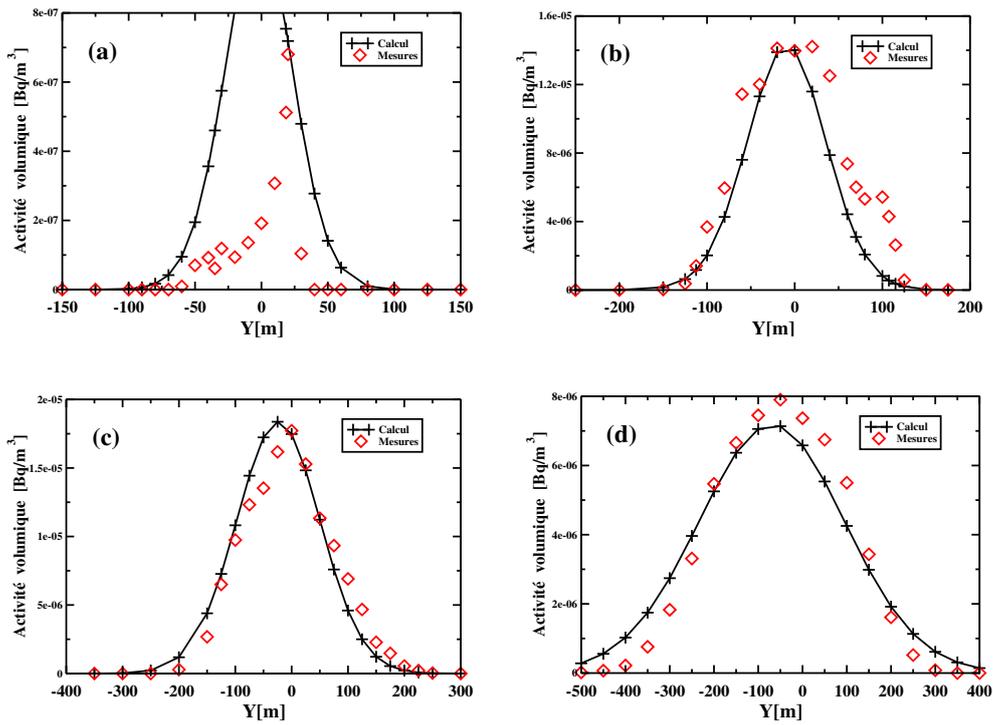


FIG. 3.2.3 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* , A_h^1 et A_h^2 (voir tableau B.3.4, page 150). 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'.

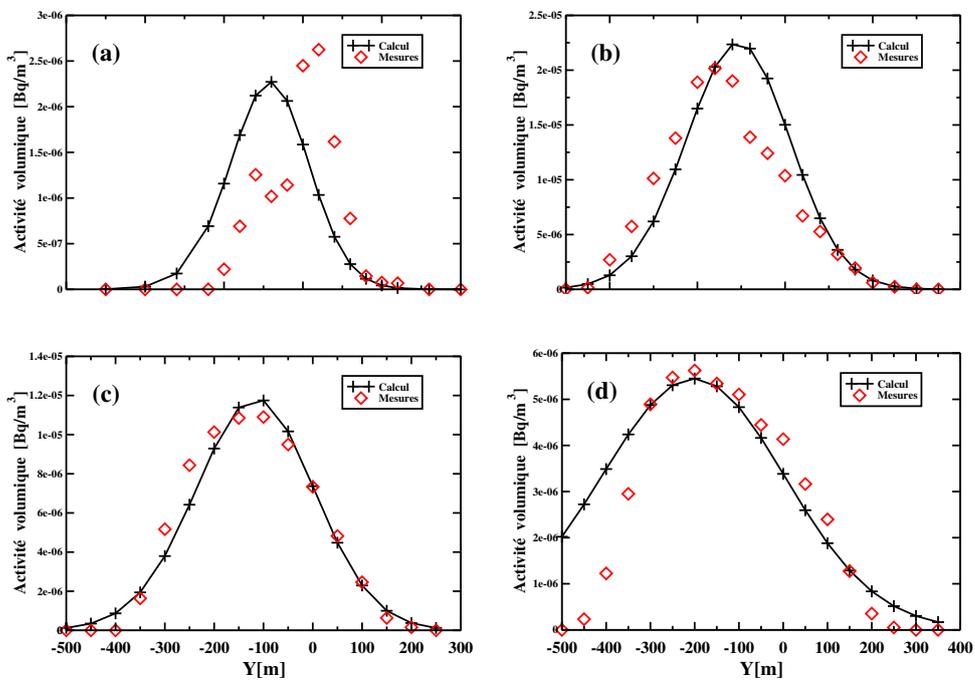


FIG. 3.2.4 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* , A_h^1 et A_h^2 (voir tableau B.3.4, page 150). 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'.

Essais d'optimisation avec le nouveau paramètre de la turbulence, λ_h

Nous avons vu dans la section précédente que pour améliorer les profils de concentration il faut absolument optimiser la vitesse du vent. Nous en avons tiré également que l'optimisation des paramètres de turbulence permet de raffiner le rapprochement des profils, visible surtout dans les valeurs de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$.

L'utilisation du coefficient A_h comme paramètre à optimiser pourrait poser des problèmes liés au fait qu'il est une fonction discontinue de s_h (voir le tableau B.1.1 dans l'annexe B.1.3, page 140). Par conséquent nous introduisons un paramètre supplémentaire λ_h qui intervient dans la description d'évolution de s_h , équation (2.2.3), de la manière suivante :

$$s_{h,n}^{(i)} = s_{h,n-1}^{(i)} + \lambda_h k_h A_h \left(s_{h,n-1}^{(i)} \right)^{\frac{k_h-1}{k_h}},$$

où l'indice i parcourt l'ensemble numérotant les bouffées et l'indice n l'ensemble numérotant les pas de temps. λ_h désigne alors une fraction de la valeur du coefficient A_h qu'on prend en compte. Contrairement à A_h , λ_h est continu en fonction de s_h . $\lambda_h = 1$ par défaut mais nous allons l'optimiser en espérant obtenir l'amélioration des nos résultats.

Comme nous l'avons obtenu pour l'optimisation de trois ou cinq paramètres, la minimisation de la fonction coût par rapport à quatre paramètres : $(\dot{q}, u, v, \lambda_h)$ conduit aux valeurs optimisées du débit, \dot{q}^* , en accord raisonnable avec la vraie valeur (tableau B.3.6, page 151). \dot{q}^* est sur-estimé de plus de 13% pour le vent du sud et de plus de 8% pour le vent du nord. Néanmoins, il s'agit des résultats qui sont plus mauvais que tous les autres résultats d'optimisation de \dot{q} sur des réseaux de 10 mesures.

En ce qui concerne les profils, on voit très peu de différence entre les profils après l'ajustement de trois paramètres et de quatre paramètres, que c'est soit pour le vent du sud (comparer la figure 3.2.1 avec figure 3.2.5) ou pour le vent du nord (la figure 3.2.2 avec figure 3.2.6). Dans les deux cas le rapprochement des profils est clairement moins bon que celui que nous avons vu en ajustant cinq paramètres. Pour le vent du sud ceci est visible surtout quand on juxtapose les figures 3.2.3 - 3.2.4 (cinq paramètres optimisés) avec les figures 3.2.1 - 3.2.2 d'un côté (trois paramètres optimisés) et avec les figures 3.2.5 - 3.2.6 de l'autre (quatre paramètres optimisés). Pour le vent du nord l'accord des profils présentés sur la figure 3.2.4 (cinq) est meilleur que l'accord sur la figure 3.2.2 d'une part (trois), ainsi que sur la figure 3.2.6 d'autre part (quatre paramètres optimisés).

En ce qui concerne la fonction coût, sa valeur calculée sur toutes les mesures et les valeurs optimisées des paramètres, $J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 3.643 \times 10^6$, est plus grande que celle calculée après l'optimisation de cinq paramètres ($J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 2.029 \times 10^6$) et plus petite que celle obtenue après l'optimisation de trois paramètres ($J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 4.245 \times 10^6$). Pour le vent du nord la fonction coût se place également entre les deux approches précédents ($J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 6.271 \times 10^6$ pour l'inversion de trois paramètres et $J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 3.641 \times 10^6$ pour l'inversion de cinq paramètres) étant plus près du premier cas, $J_{\text{all}}^{\text{optim}} = 6.009 \times 10^6$.

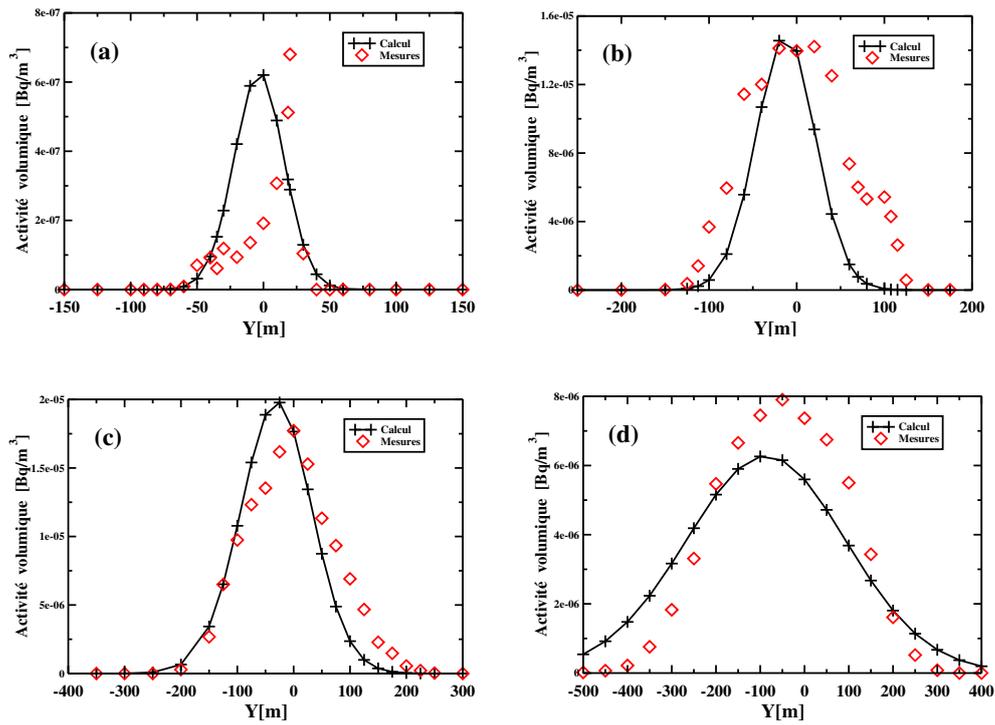


FIG. 3.2.5 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* et λ_h^* (voir tableau B.3.6, page 151). Vent du sud. 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'

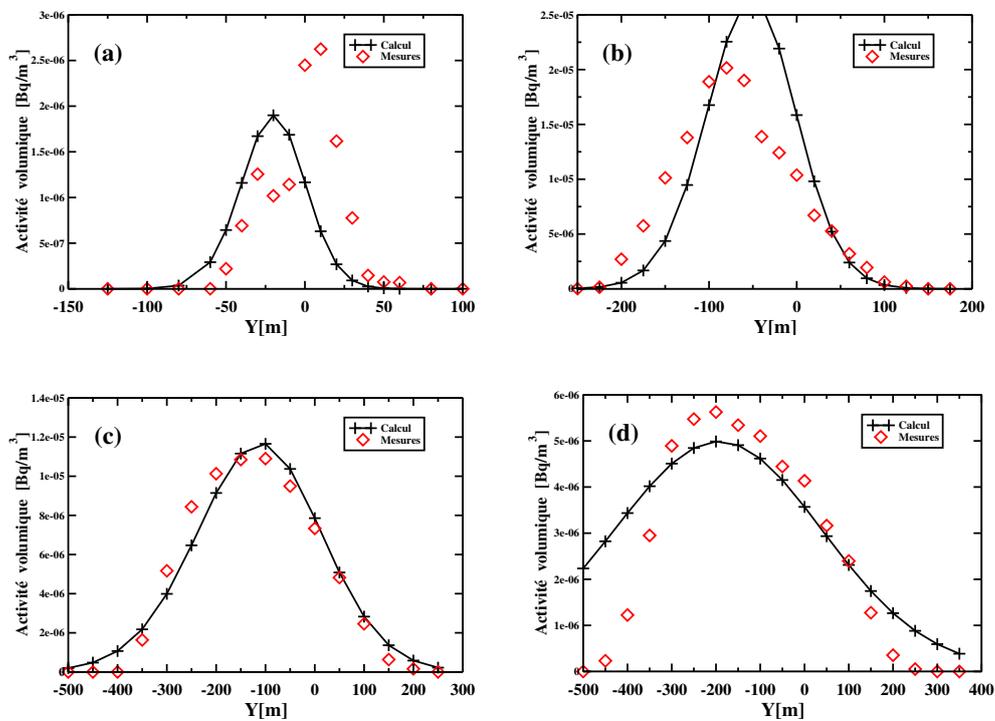


FIG. 3.2.6 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* et λ_h^* (voir tableau B.3.6, page 151). Vent du nord. 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'

3.2.3 Optimisation effectuée sur toutes les mesures

Cette fois-ci on se propose de regarder quels pourraient être les résultats de la modélisation inverse dans le cas où nous aurions disposé de l'ensemble de l'information sur le processus de dispersion. On cherche donc à optimiser les paramètres sur toutes les mesures disponibles au sol. On dispose de 328 mesures pour le vent du sud et de 236 pour le vent du nord (voir chapitre 2).

Optimisation simultanée de \dot{q} , u et v . Toutes les mesures

En comparant les profils éloignés de la source pour le vent du nord (figures 3.2.8(c) et 3.2.8(d) à comparer avec figures 3.2.2(c) et 3.2.2(d)), nous remarquons que les résultats d'inversion sur toutes les mesures sont de qualité inférieure aux résultats obtenus en s'appuyant sur un réseau de seulement 10 mesures. Par contre, pour un des profils près de la source (figures 3.2.8(a) et (b) et figures 3.2.2(a) et (b)), les résultats optimisés sur toutes les mesures conduisent à un meilleur accord avec le profil mesuré. En même temps, on voit dans le tableau B.3.8, page 151, que le débit de la source est sous-estimé de presque 20% et que la composante u de la vitesse optimisée sur toutes les mesures est plus petite que celle que nous avons vue en optimisant sur dix mesures (tableau B.3.2, page 150).

En comparant les profils pour le vent du sud (figure 3.2.7(d) et figure 3.2.1(d)) nous remarquons que la composante $v^* = -6.337 \times 10^{-2}$ (tableau B.3.8, page 151) rend mieux la symétrie des mesures par rapport à $x = -50$ m que $v^* = -0.139$ (tableau B.3.2, page 150) obtenue dans la section 3.2.2. Mais de nouveau les valeurs maximales de la concentration pour les profils loin de la source (toujours la figure 3.2.7(d)) sont sous-estimées. Il est de même pour le débit de la source sous-estimé de 5% et pour la vitesse u^* qui diminue entre l'optimisation sur le réseau (tableau B.3.2, page 150) et l'optimisation actuelle effectuée sur toutes les mesures (tableau B.3.8, page 151).

Il ne fait pas de doute que la sur-estimation de la concentration près de la source et sa sous-estimation à la sortie du domaine sont des effets conjoints de la sous-estimation du débit \dot{q} et de la vitesse u . D'autant plus que les sous-estimations de ces deux paramètres sont plus importantes pour le vent du nord que pour le vent du sud et les profils pour le vent du nord se dégradent davantage que les profils pour le vent du sud. Bien qu'il soit difficile de trancher sans ambiguïté quel est précisément l'influence de chacun de ces deux paramètres sur la forme des profils de concentration, nous présumons que c'est la diminution de la vitesse optimisée qui fait monter la concentration à la proximité de la source. Nous supposons que la sous-estimation du débit conduit à la sous-estimation des concentrations pour les profils éloignés. Fort probablement des difficultés similaires de discrimination de ces deux variables, ont poussé [Drews, 2005] d'estimer la valeur de $\frac{\dot{q}}{u}$ dans son approche à l'estimation des paramètres du modèle de panache gaussien (voir chapitre 1).

Si, maintenant, on regarde les valeurs de la fonction coût sur toutes les mesures obtenues pour les paramètres optimisés, on constate évidemment que l'optimisation sur toutes les mesures est meilleure que sur un réseau restreint des mesures - la valeur de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$ dans le tableau B.3.3 et dans le tableau B.3.9, page 150 et 152 respectivement. Le test dans ce second cas étant fait par rapport à toutes les mesures qui ont été utilisées dans le processus d'optimisation.

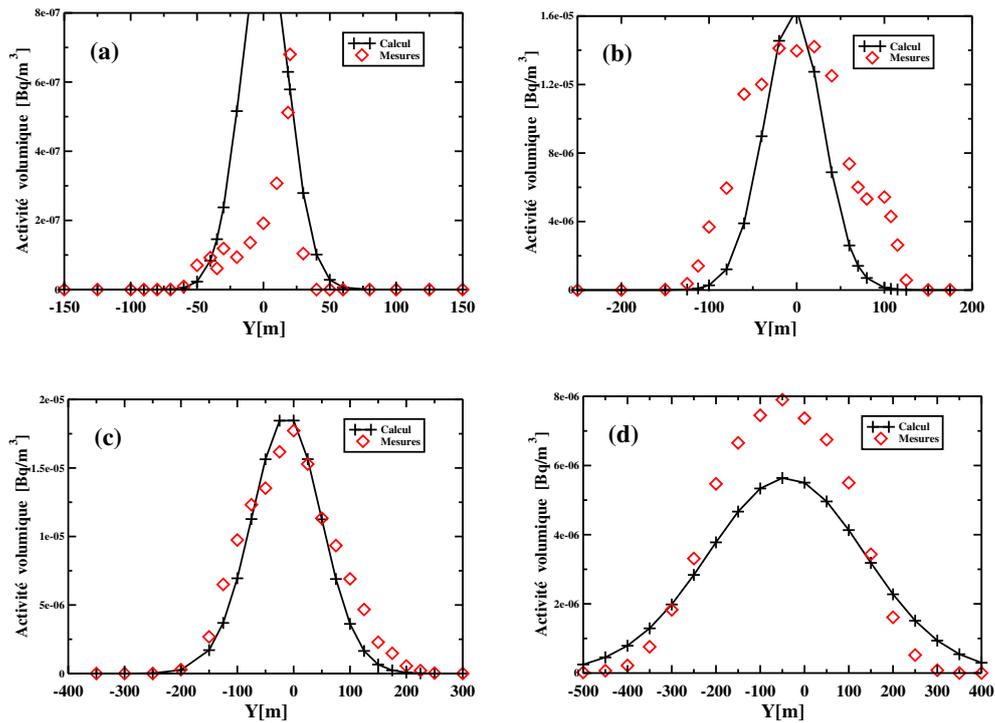


FIG. 3.2.7 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* et v^* sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.8, page 151). 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **sud**

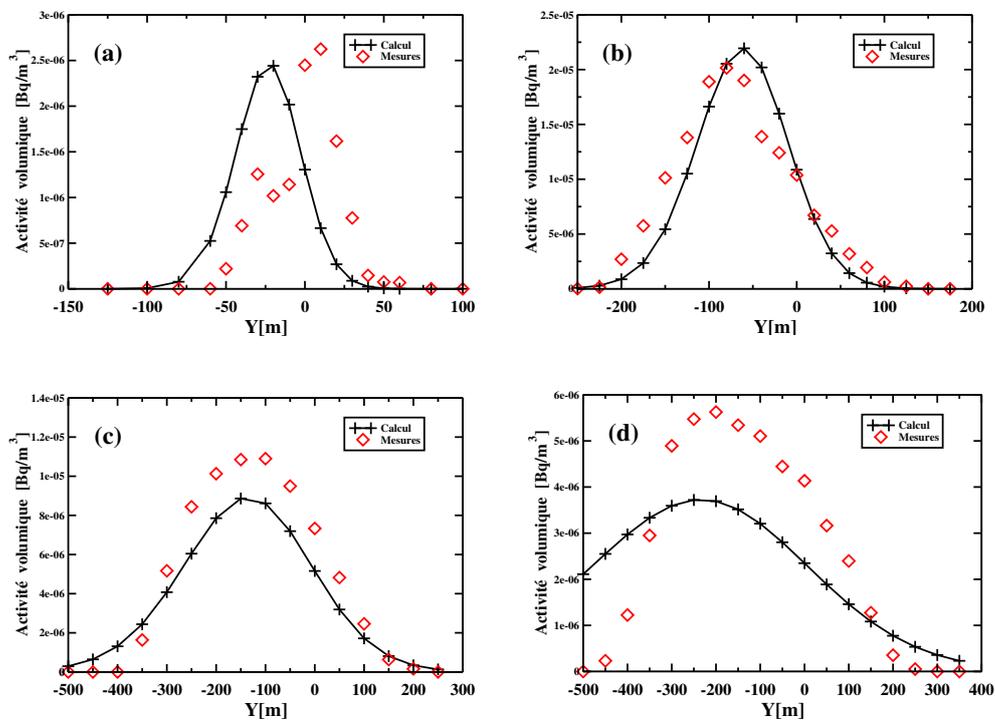


FIG. 3.2.8 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* et v^* sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.8, page 151). 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **nord**

Optimisation simultanée de \dot{q} , u , v , A_h^1 et A_h^2 . Toutes les mesures. De la même manière que nous l'avons fait pour l'optimisation des trois paramètres (section 3.2.2), nous présentons aussi les résultats d'inversion simultanée de \dot{q} , u , v , A_h^1 et A_h^2 sur toutes les mesures. Les valeurs de la fonction coût calculée sur toutes les mesures après l'optimisation de cinq paramètres, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, sont naturellement les plus petites parmi toutes les valeurs de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$ analysées à ce stade. L'amélioration de l'accord des profils jugée selon les valeurs de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, n'est pas nécessairement confirmée par la qualité de chaque profil considéré séparément. L'amélioration de l'accord des profils dans la figure 3.2.9(c) par rapport à la figure 3.2.3(c) ou figure 3.2.10(d) par rapport à la figure 3.2.4(d) étant perceptible, elle est moins évidente si on compare les figure 3.2.9(d) et figure 3.2.3(d) et ne l'est pas du tout pour le passage entre les figure 3.2.9(b) et figure 3.2.4(b). Le prix de la diminution de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$ est la dégradation d'imitation par \dot{q}^* de la vraie valeur du débit par rapport aux résultats produits en inversant sur des réseaux de 10 mesures ($\dot{q}^* = 1.154$ pour le vent du nord et $\dot{q}^* = 0.978$ pour le vent du sud, tableau B.3.10, page 152, à comparer respectivement avec $\dot{q}^* = 1.128$ et par $\dot{q}^* = 1.006$ que nous avons vus dans la section 3.2.2, tableau B.3.4, page 150).

Optimisation simultanée de \dot{q} , u , v et λ_h . Toutes les mesures. Les essais d'optimisation s'achèvent avec l'inversion de \dot{q} , u , v et λ_h sur toutes les mesures disponibles au sol. Dans un premier temps la valeur optimisée du débit, \dot{q}^* , est comparée avec les valeurs obtenues dans le cadre d'ajustement de trois ou cinq paramètres en s'appuyant sur toutes les mesures disponibles. Nous remarquons que l'approche reposant sur quatre paramètres fournit les \dot{q}^* de qualité inférieure que les autres cas de figures, à l'exception d'optimisation de trois paramètres pour le vent du nord (voir les tableaux B.3.2 et B.3.12, pages 150 et 152).

Pour les deux directions du vent les valeurs de la fonction coût, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, se placent entre les valeurs obtenues en optimisant trois paramètres (tableau B.3.9) et les valeurs obtenues en optimisant cinq paramètres (tableau B.3.11, page 152). Ce résultat est tout à fait conforme à l'intuition, l'optimisation d'un nombre croissant des paramètres permettant plus de souplesse au modèle direct.

Pour les profils pour le vent du sud, nous remarquons que l'introduction de λ_h n'élimine pas la sous-estimation des concentrations maximales pour les profils éloignés ce qui était bien le résultat d'introduction de A_h à l'ensemble des paramètres optimisés (la figure 3.2.7(d) pour l'inversion de trois paramètres à comparer avec la figure 3.2.11(d) pour l'inversion de quatre paramètres et avec la figure 3.2.9(d) pour l'inversion de cinq paramètres).

Bien qu'il semble que les profils près de la source tracés pour l'inversion de quatre paramètres (figure 3.2.11(a) et figure 3.2.11(b)) donnent les meilleurs résultats que l'inversion sans les paramètres de turbulence (figure 3.2.7(a) et figure 3.2.7(b)) ou l'inversion avec A_h (figure 3.2.9(a) et figure 3.2.9(b)), il faut demeurer prudent pour ne pas en tirer des conclusions trop hâtives. En effet, il s'agit des profils mesurés qui n'ont pas encore atteint de la forme gaussienne. Pour le vent du nord les profils loin de la source s'approchent plutôt de ceux résultant de l'optimisation de trois paramètres (figure 3.2.12(c) et figure 3.2.12(d) à comparer avec les figure 3.2.8(c) et figure 3.2.8(d)) que de ceux que nous avons présentés pour l'inversion de cinq paramètres (figure 3.2.12(c) et figure 3.2.12(d) à comparer avec les figure 3.2.10(c) et figure 3.2.10(d)).

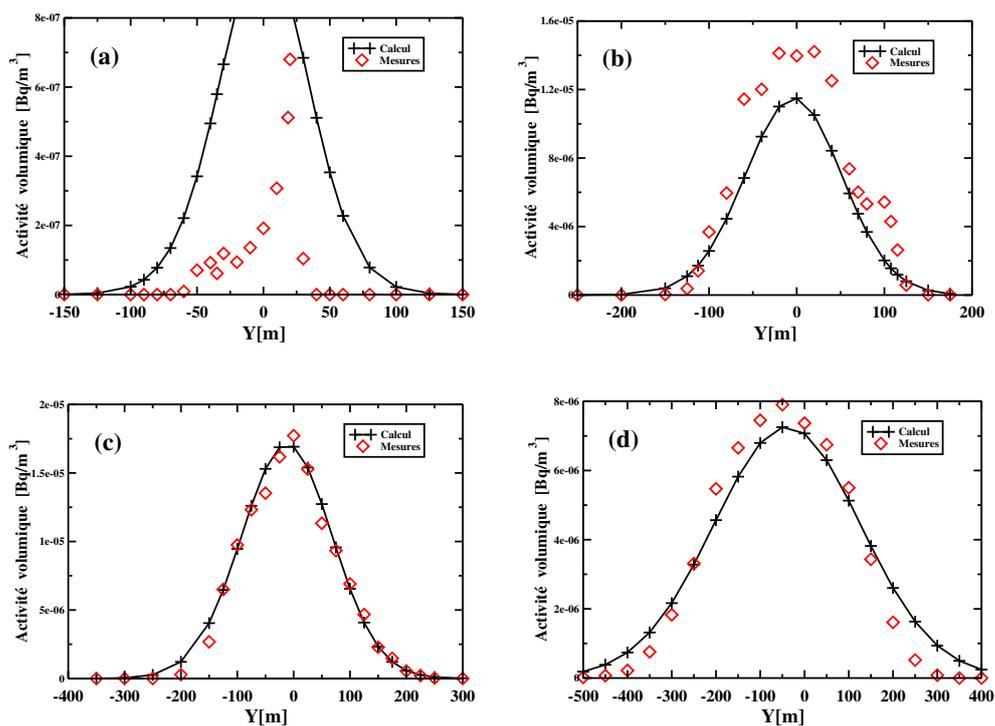


FIG. 3.2.9 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* , A_h^{1*} et A_h^{2*} sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.10, page 152). 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées 'o' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **sud**

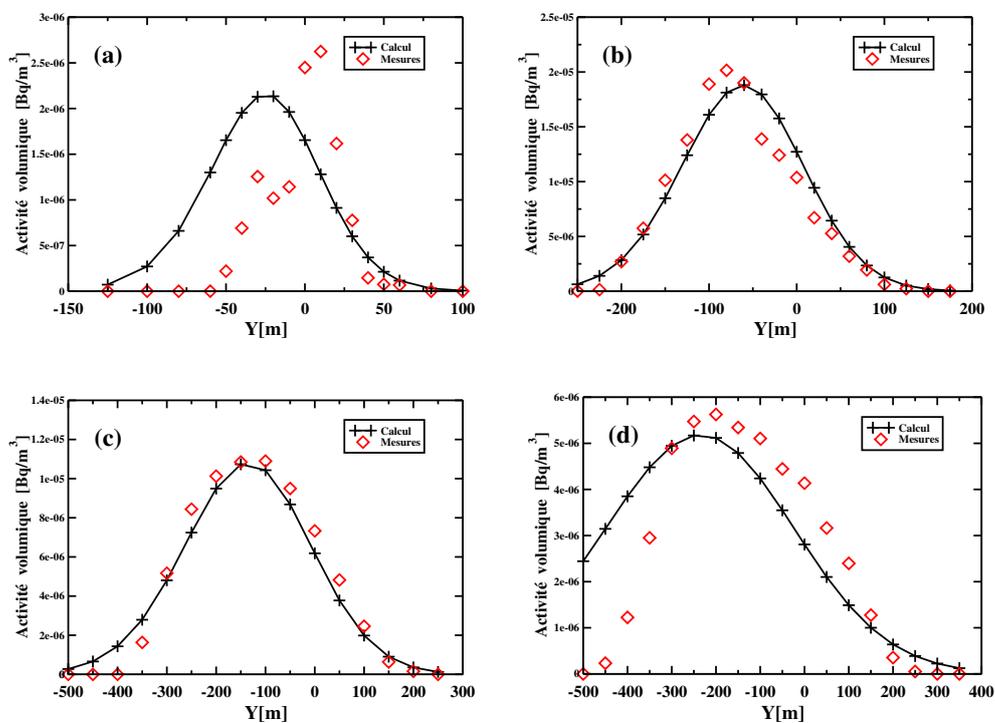


FIG. 3.2.10 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* , v^* , A_h^{1*} et A_h^{2*} sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.10, page 152). 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées 'o' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **nord**

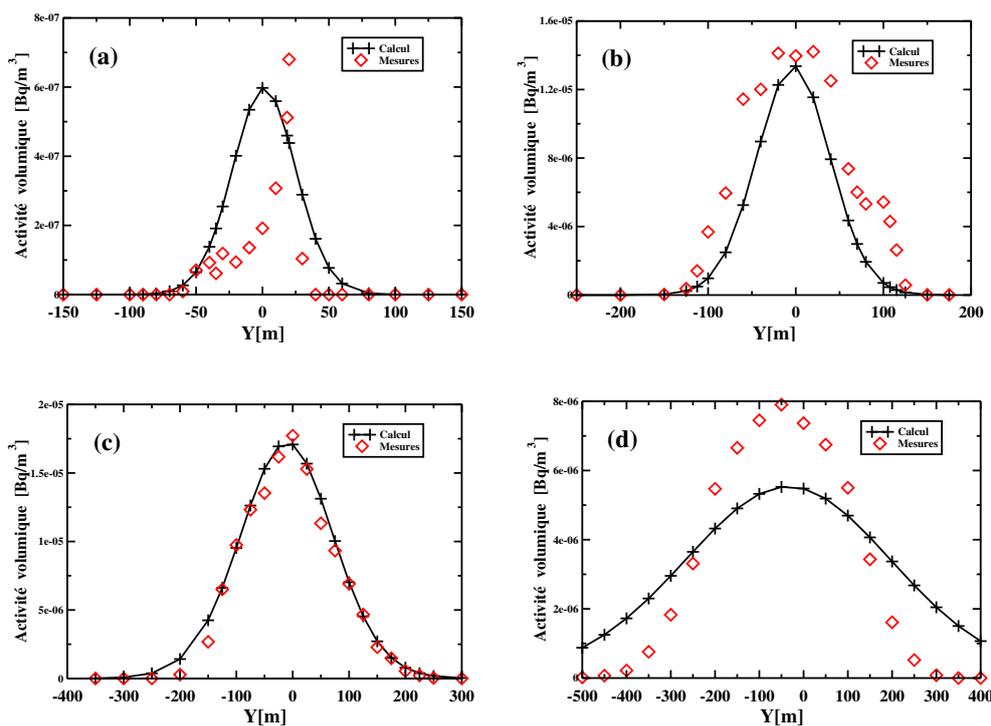


FIG. 3.2.11 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \hat{q}^* , u^* , v^* et λ_h^* sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.12, page 152). 240m(a), 450m(b), 850m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **sud**

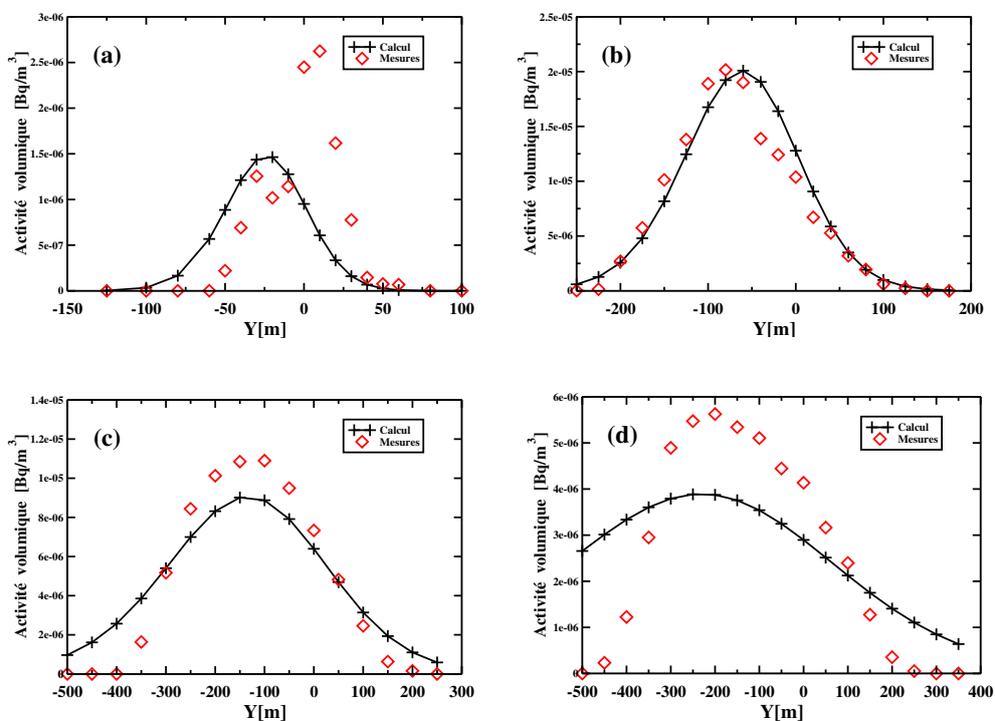


FIG. 3.2.12 – Comparaison modèle-mesures pour des valeurs optimisées \hat{q}^* , u^* , v^* et λ_h^* sur **toutes** les mesures (voir tableau B.3.12, page 152). 80m(a), 450m(b), 1150m(c), 2100m(d) par rapport à l'origine. Mesures notées '◇' et sorties du modèle aux points de mesure '+'. Vent du **nord**

3.3 Évaluation des réseaux de mesures

Motivation. Dans cette section nous nous penchons sur le problème du nombre et de la qualité d'observations. La question est analysée dans le cadre d'inversion de 3 paramètres. Ce cadre a été choisi parce qu'il met en balance le coût du calcul et la qualité des résultats d'inversion.

Nous avons vu dans la section précédente que les deux réseaux composés de 10 stations, figure 2.2.3, page 47, donnent des résultats de qualité. Néanmoins, en cas d'accident le nombre de mesures peut-être peu abondant. C'est dans l'optique d'examiner la possibilité de diminuer le nombre de stations de mesure, que nous nous posons la question du nombre minimal de mesures nécessaires pour obtenir les résultats de qualité similaire. Dès lors on exécute des inversions sur des sous-ensembles du réseau originel.

Deux tentatives d'aboutir à ces fins sont présentées ici. La première s'appuie sur le critère d'erreur modèle, la deuxième sur une technique inspirée par la validation croisée.

3.3.1 Ordonnement des stations selon l'erreur modèle

Les observations sont comparées avec les sorties du modèle direct obtenus sur des paramètres de la soufflerie, voir section 2.2.3. Nous considérons comme bons les points du réseau qui sont caractérisés par un petit écart entre les deux quantités. Ce critère permet de ranger les points du réseau du meilleur au pire, voir la colonne R_k dans le tableau 3.3.1 pour le vent du sud et dans le tableau 3.3.2 pour le vent du nord, voir page suivante. La qualité des résultats d'inversion en fonction de la qualité et dimension de l'ensemble des observations est ensuite analysée.

Position		Activité volumique [$\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$]			Écart			
x[m]	y[m]	Mesure	Modèle	s_o	Carré [$(\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3})^2$]	Rk	Normalisé	Rk _N
450	0	1.397×10^{-5}	1.445×10^{-5}	1.0×10^{-6}	2.305×10^{-13}	3	1.182×10^{-3}	1
850	0	1.772×10^{-5}	1.947×10^{-5}	1.0×10^{-6}	3.062×10^{-12}	7	9.749×10^{-3}	2
1150	-250	1.477×10^{-6}	1.478×10^{-7}	1.0×10^{-8}	1.768×10^{-12}	5	8.10×10^{-1}	7
1150	250	5.060×10^{-8}	2.056×10^{-7}	1.0×10^{-8}	2.403×10^{-14}	2	9.387×10^0	9
1450	-100	9.561×10^{-6}	6.562×10^{-6}	1.0×10^{-7}	8.993×10^{-12}	10	9.839×10^{-2}	3
1750	-500	0.0	1.276×10^{-8}	1.0×10^{-9}	1.629×10^{-16}	1	-	-
1750	-200	5.489×10^{-6}	2.530×10^{-6}	1.0×10^{-7}	8.755×10^{-12}	9	2.906×10^{-1}	5
1750	200	1.780×10^{-6}	2.821×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.082×10^{-12}	4	3.415×10^{-1}	6
2100	250	5.195×10^{-7}	2.064×10^{-6}	1.0×10^{-7}	2.386×10^{-12}	6	8.844×10^0	8
2500	-200	5.543×10^{-6}	2.780×10^{-6}	1.0×10^{-7}	7.632×10^{-12}	8	2.484×10^{-1}	4

TAB. 3.3.1 – Caractéristiques du réseau pour le vent du **sud**. Position des points de mesure constituant le réseau. Activité volumique mesurée (Mesure) et calculée (Modèle) avec les vraies/par défaut valeurs des paramètres d'entrée. L'erreur d'observation s_o . Carré d'écart entre les mesures et les sorties du modèle. Même écart normalisé. Ordonnancement des observations selon les deux écarts, Rk et Rk_N

Position		Activité volumique [$\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$]			Écart			
x[m]	y[m]	Mesure	Modèle	s_o	Carré [$(\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3})^2$]	Rk	Normalisé	Rk _N
120	0	4.14×10^{-6}	1.539×10^{-6}	1.0×10^{-7}	6.786×10^{-12}	4	3.952×10^{-1}	5
200	-10	1.18×10^{-5}	6.811×10^{-6}	1.0×10^{-7}	2.487×10^{-11}	3	1.787×10^{-1}	9
200	100	2.34×10^{-7}	1.436×10^{-9}	1.0×10^{-10}	5.405×10^{-14}	7	9.878×10^{-1}	2
300	0	1.42×10^{-5}	1.432×10^{-5}	1.0×10^{-6}	1.119×10^{-14}	1	5.536×10^{-5}	1
625	75	2.87×10^{-6}	6.306×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.178×10^{-11}	8	1.427×10^0	7
850	-150	1.30×10^{-5}	1.963×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.213×10^{-10}	6	7.204×10^{-1}	10
1150	200	1.57×10^{-7}	1.234×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.160×10^{-12}	10	4.692×10^1	3
1450	-100	8.55×10^{-6}	6.754×10^{-6}	1.0×10^{-7}	3.215×10^{-12}	2	4.401×10^{-2}	4
1750	100	2.23×10^{-6}	5.544×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.099×10^{-11}	9	2.215×10^0	6
2100	-300	4.89×10^{-6}	1.439×10^{-6}	1.0×10^{-7}	1.192×10^{-11}	5	4.982×10^{-1}	8

TAB. 3.3.2 – Caractéristiques du réseau pour le vent du **nord**. Position des points de mesure constituant le réseau. Activité volumique mesurée (Mesure) et calculée (Modèle) avec les vraies/par défaut valeurs des paramètres d'entrée. L'erreur d'observation s_o . Carré d'écart entre les mesures et les sorties du modèle. Même écart normalisé. Ordonnancement des observations selon les deux écarts, Rk et Rk_N

Puisqu'il s'agit de l'inversion de trois paramètres, le nombre minimal des points du réseau est aussi égal à trois. Nous commençons donc par un réseau des trois meilleures observations classées selon le critère décrit ci-dessus. Ensuite, à chaque pas, des réseaux sont étendus par une station. La station ajoutée est toujours la meilleure parmi celles qui restent. Des résultats d'inversion sont présentés dans les tableaux B.3.14 - B.3.18 (annexe B.3.3, pages 153 - 154). Ils sont jugés selon la valeur du débit inversé d'une part et, d'autre part, par la valeur de la fonction coût calculée sur tous les points de mesure, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, voir les tableaux B.3.19 et B.3.20, page 154. La fonction coût a été évaluée à la base des valeurs optimisées \dot{q}^* , u^* et v^* pour toutes les mesures disponibles, pour une direction du vent donnée.

On remarque que, pour le vent du nord, les valeurs de la fonction coût diminuent avec l'augmentation du nombre des stations de mesure. Puisque chaque augmentation du nombre des points de mesure revient à y inclure une observation de qualité inférieure à toutes celles qui constituent déjà le réseau, au premier abord cette amélioration peut paraître contre intuitive. Pour le vent du sud en revanche la qualité des résultats ne suit pas le nombre de mesures. Cette qualité augmente dans le premier pas, puis se détériore dans le deuxième, augmente ensuite dans le pas suivant sans qu'une tendance claire puisse être discernée. Cette dégradation pourrait conforter la position qu'ajouter au réseau des points de qualité inférieure à ceux qui le constituent déjà, conduit à la dégradation des résultats. Mais une telle thèse serait difficilement soutenable par le fait que les réseaux de 10 mesures donnent de meilleurs résultats que les réseaux de 3 mesures. C'est le fait que nous remarquons, à la fois en comparant les résultats d'inversion dans les tableaux B.3.14 et B.3.2 (pages 153 et 150), ainsi que sur les valeurs de la fonction coût dans les tableaux B.3.19 et B.3.20 (page 154, première et dernière entrée respectivement).

L'explication est la suivante. Des valeurs des paramètres ont été mesurées dans la soufflerie et prises ensuite comme entrées pour le modèle à bouffées gaussiennes. Le modèle décrit sans doute très bien des concentrations moyennes du polluant rejeté dans le cadre d'un domaine plat, sans bâtiments. En réalité des formes variées du terrain aussi bien que les bâtiments, en particulier des tours aéroréfrigérantes, introduisent un effet perturbateur responsable des écarts entre des mesures et des prédictions du modèle. L'erreur de mesure étant négligée, ces écarts reflètent l'erreur d'observation et dans ce cas précis, l'erreur de modèle à bouffées. En un point donné, la valeur de l'erreur modèle est fixée mais varie entre des différents points du domaine sous-estimant ou sur-estimant les résultats mesurés selon les endroits choisis. Par conséquent l'erreur modèle prend des valeurs positives et négatives. Nous affirmons donc que, bien que dans un point donné il s'agit d'une seule perturbation possible autour du modèle à bouffées, globalement cette perturbation se comporte comme une variable aléatoire. Prendre en compte un nombre élevé de mesures revient à étudier le nombre élevé des réalisations de cette variable. Par conséquent, plus grand est le nombre de mesures, plus l'erreur modèle a des chances d'être compensée. Ceci explique l'amélioration successive du comportement des résultats de la modélisation inverse pour le vent du nord.

Néanmoins, pour un nombre petit de mesures, l'accumulation des valeurs du même signe est possible. Le biais qui survient est parfois responsable de la détérioration des résultats (comme le passage entre 4 et 5 points de mesure pour le vent du sud, voir tableau B.3.19, page 154, deuxième et troisième entrée).

Ayant pour objectif d'illustrer ce raisonnement nous proposons de faire le calcul suivant. Imaginons, pour simplifier, qu'on dispose de deux mesures μ_1 et μ_2 en deux

points différents du domaine. La liaison entre une mesure et le vrai état du système X^t s'exprime par :

$$\begin{aligned}\mu_1 &= H_1 X^t + \epsilon_1 \\ \mu_2 &= H_2 X^t + \epsilon_2.\end{aligned}$$

Si on assimilait seulement une de ces mesures, alors l'erreur d'analyse serait :

$$X^* - X^t = \frac{\epsilon_1}{H_1}, \quad \text{ou} \quad X^* - X^t = \frac{\epsilon_2}{H_2},$$

dans le premier et deuxième cas, respectivement. Si on assimile les deux mesures et on suppose, en idéalisant, que les erreurs de notre modèle, représenté par H_1 et H_2 , sont telles que $\epsilon_1, \epsilon_2 \sim N(0, s^2)$, alors la fonction coût s'écrit :

$$J(X) = \frac{1}{2} \frac{(\mu_1 - H_1 X)^2}{s^2} + \frac{1}{2} \frac{(\mu_2 - H_2 X)^2}{s^2}.$$

La minimisation de la fonction coût conduit à la valeur optimisée :

$$X^* = \frac{\mu_1 H_1 + \mu_2 H_2}{H_1^2 + H_2^2}$$

dont l'erreur est :

$$X^* - X^t = \frac{H_1 \epsilon_1 + H_2 \epsilon_2}{H_1^2 + H_2^2}. \quad (3.3.1)$$

Imaginons maintenant, pour figer l'attention et simplifier l'analyse, que $H_2 = 2H_1$ et dans un premier temps que $\epsilon_2 = -\epsilon_1$. Alors l'erreur d'analyse effectuée sur les deux mesures vaut :

$$X^* - X^t = \frac{H_1 \epsilon_1 + H_2 \epsilon_2}{H_1^2 + H_2^2} = \frac{H_1 \epsilon_1 - 2H_1 \epsilon_1}{H_1^2 + 4H_1^2} = -\frac{\epsilon_1}{5H_1},$$

ce qui, en valeur absolue, est plus petite que l'erreur d'analyse obtenue en se servant de n'importe laquelle de ces deux mesures séparément,

$$X^* - X^t = \frac{\epsilon_1}{H_1} \quad \text{ou} \quad X^* - X^t = -\frac{\epsilon_1}{2H_1},$$

respectivement. Nous présumons que c'est cette situation que nous rencontrons en ajoutant successivement les mesures au réseau pour le vent du nord.

Dans un deuxième temps nous imaginons que $\epsilon_2 = 3\epsilon_1$. L'erreur d'analyse prenant en compte les deux mesures s'exprime par :

$$X^* - X^t = \frac{H_1 \epsilon_1 + H_2 \epsilon_2}{H_1^2 + H_2^2} = \frac{H_1 \epsilon_1 + 6H_1 \epsilon_1}{H_1^2 + 4H_1^2} = \frac{7\epsilon_1}{5H_1}.$$

Elle est inférieure à l'erreur d'analyse sur la deuxième mesure, $\frac{3\epsilon_1}{H_1}$, mais elle est plus grande que l'erreur d'analyse sur la première mesure, $\frac{\epsilon_1}{H_1}$. Ainsi, le fait d'ajouter la deuxième mesure à la première dégrade le résultat. Nous soupçonnons que c'est ce que nous rencontrons au moment de passage entre les réseaux de 4 et de 5 mesures pour le vent du sud et qui conduit à une forte dégradation des résultats (tableau B.3.19, page 154).

Finalement, nous regardons comment se généralise l'erreur d'analyse, (3.3.1), pour N mesures :

$$X^* - X^t = \frac{\sum_{i=1}^N H_i \epsilon_i}{\sum_{i=1}^N H_i^2}. \quad (3.3.2)$$

Imaginons que la suite $\{H_i\}_{i=1}^\infty$ soit bornée. Nous supposons qu'il existe α tel que $|H_i| < \alpha$ pour tout i et β tel que $|H_i| > \beta$ pour tout i . L'erreur d'analyse est alors majorée par

$$X^* - X^t = \frac{\sum_{i=1}^N H_i \epsilon_i}{\sum_{i=1}^N H_i^2} \leq \alpha \frac{\sum_{i=1}^N \epsilon_i}{\sum_{i=1}^N H_i^2} \leq \frac{\alpha}{\beta^2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_i \longrightarrow 0.$$

La série en question serait convergente puisque :

$$-(X^* - X^t) = -\frac{\sum_{i=1}^N H_i \epsilon_i}{\sum_{i=1}^N H_i^2} \leq -\beta \frac{\sum_{i=1}^N \epsilon_i}{\sum_{i=1}^N H_i^2} \leq -\frac{\beta}{\alpha^2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_i \longrightarrow 0.$$

Nous considérons la situation que nous rencontrons pour les réseaux de 10 mesures comme correspondant à la convergence de la formule 3.3.2 qui tend vers 0 pour N grand sous les hypothèses supplémentaires concernant les caractéristiques de la suite $\{H_i\}_{i=0}^\infty$.

Pour conclure, on remarque que pour avoir des bons résultats de l'inversion il suffit de s'appuyer sur un réseau de 7 mesures pour le vent du nord mais qu'il est nécessaire de s'appuyer sur 10 mesures pour le vent du sud. D'où on déduit qu'en général il n'est pas possible de réduire le réseau de mesures sur la base du critère de l'erreur modèle.

3.3.2 Tests croisés de la qualité des mesures

Ensuite, le problème de la compatibilité entre le modèle et les mesures a été abordé. La méthode qu'on propose ici a été inspirée par la validation croisée, présentée dans [Craven et Wahba, 1979]. Pour un ensemble donné de 10 stations de mesure nous considérons tous les sous-ensembles de 9 éléments. Des mesures sont ensuite assimilées dans le modèle gaussien et les trois paramètres \dot{q} , u et v inversés sur chaque sous-ensemble. Suite de toute inversion on obtient \dot{q}^* , u^* et v^* qui à leur tour deviennent des entrées du modèle. Des sorties sont ensuite calculées à la 10-ème station de mesure, celle qui n'a pas participé à l'optimisation. L'écart entre le modèle et la mesure indique le degré de compatibilité de deux quantités. Il permet de ranger les stations de mesure en partant de celle qui s'accorde le mieux au modèle jusqu'à celle qui diffère le plus de lui (voir tableaux 3.3.3 et 3.3.4, page 87).

Vent du sud. En comparant les résultats, tableau 3.3.3, avec la carte du panache (voir figure 2.2.3, page 47), on remarque que cette méthode désigne les mesures au bord du panache comme celles qui sont difficilement reproductibles et celles au cœur du panache comme facilement décrites par le modèle, ce qui est physiquement attendu. Les trois mesures qui conduisent au plus grand écart normalisé par la valeur de la mesure, sont localisées à (1750, -500) (bien qu'il s'agit d'une mesure difficilement qualifiable selon ce schéma car elle est nulle et par conséquent son écart normalisé est infini), (2100, 250) et (1150, -200). Les résultats d'inversion sur le réseau privé de ces trois points sont montrés dans le tableau B.3.21 (annexe B.3, page 154). Nous remarquons

qu'il s'agit des résultats de la même qualité que les résultats obtenus avec le réseau de 10 mesures (voir tableau B.3.2, également dans l'annexe B.3, page 150). Ceci est reflété non seulement par des valeurs des paramètres inversés mais aussi par des valeurs de la fonction coût (tableau B.3.3, page 150 et tableau B.3.22, page 155).

Mesure enlevée		q^* [Bq.s ⁻¹]	u^* [m.s ⁻¹]	v^* [m.s ⁻¹]	Activité volumique [Bq.m ⁻³]		Carré d'écart [(Bq.m ⁻³) ²]	Normalisé	Rk _N	
Rk	x [m]				y [m]	Modèle				Mesure
8	2500	-200	1.020	2.975	-0.132	4.198 × 10 ⁻⁶	5.543 × 10 ⁻⁶	1.890 × 10 ⁻¹²	5.889 × 10 ⁻²	5
6	2100	250	1.042	2.991	-0.139	8.155 × 10 ⁻⁷	5.195 × 10 ⁻⁷	8.766 × 10 ⁻¹⁴	3.249 × 10 ⁻¹	9
4	1750	200	1.046	2.997	-0.142	1.072 × 10 ⁻⁶	1.780 × 10 ⁻⁶	5.021 × 10 ⁻¹³	1.584 × 10 ⁻¹	7
9	1750	-200	1.039	2.994	-0.137	5.311 × 10 ⁻⁶	5.489 × 10 ⁻⁶	3.165 × 10 ⁻¹⁴	1.051 × 10 ⁻³	1
1	1750	-500	1.043	2.992	-0.140	8.344 × 10 ⁻⁸	0	6.962 × 10 ⁻¹⁵	-	(10)
10	1450	-100	1.104	3.033	-0.156	1.109 × 10 ⁻⁵	9.561 × 10 ⁻⁶	2.343 × 10 ⁻¹²	2.563 × 10 ⁻²	3
2	1150	250	1.043	2.992	-0.139	3.373 × 10 ⁻⁸	5.060 × 10 ⁻⁸	2.846 × 10 ⁻¹⁶	1.112 × 10 ⁻¹	6
5	1150	-250	1.043	3.008	-0.136	7.234 × 10 ⁻⁷	1.477 × 10 ⁻⁶	5.683 × 10 ⁻¹³	2.604 × 10 ⁻¹	8
7	850	0	0.994	2.900	-0.158	1.605 × 10 ⁻⁵	1.772 × 10 ⁻⁵	2.797 × 10 ⁻¹²	8.906 × 10 ⁻³	2
3	450	0	1.031	2.772	-0.136	1.681 × 10 ⁻⁵	1.397 × 10 ⁻⁵	8.102 × 10 ⁻¹²	4.154 × 10 ⁻²	4

TAB. 3.3.3 – Rang et coordonnées de points enlevés. Résultats de l'inversion de (\hat{q}, u, v) . Activités volumiques au point enlevé. Écart entre les deux activités volumiques. Enfin, le nouveau rangement des mesures, Rk_N. Vent du **sud**

M.KRYSTA

Mesure enlevée		\hat{q}^* [Bq.s ⁻¹]	u^* [m.s ⁻¹]	v^* [m.s ⁻¹]	Activité volumique [Bq.m ⁻³]		Carré d'écart [(Bq.m ⁻³) ²]	Normalisé	Rk _N	
Rk	x [m]				y [m]	Modèle				Mesure
8	2100	-300	1.035	2.431	-0.210	4.481 × 10 ⁻⁶	4.892 × 10 ⁻⁶	1.688 × 10 ⁻¹³	7.051 × 10 ⁻³	4
6	1750	100	1.046	2.442	-0.210	2.489 × 10 ⁻⁶	2.228 × 10 ⁻⁷	6.798 × 10 ⁻¹⁴	1.370 × 10 ⁻²	6
4	1450	-100	1.045	2.440	-0.211	8.572 × 10 ⁻⁶	8.547 × 10 ⁻⁶	6.095 × 10 ⁻¹⁶	8.344 × 10 ⁻⁶	1
3	1150	200	1.043	2.437	-0.211	4.383 × 10 ⁻⁷	1.572 × 10 ⁻⁷	7.898 × 10 ⁻¹⁴	3.195	0
10	850	-150	1.029	2.444	-0.206	1.247 × 10 ⁻⁵	1.298 × 10 ⁻⁵	2.535 × 10 ⁻¹³	1.506 × 10 ⁻³	3
7	625	75	1.045	2.440	-0.213	2.098 × 10 ⁻⁶	2.874 × 10 ⁻⁶	6.024 × 10 ⁻¹³	7.294 × 10 ⁻²	8
1	300	0	1.039	2.435	-0.213	1.340 × 10 ⁻⁵	1.422 × 10 ⁻⁵	4.765 × 10 ⁻¹⁴	2.358 × 10 ⁻⁴	2
2	200	100	1.043	2.438	-0.211	1.394 × 10 ⁻⁹	2.339 × 10 ⁻⁷	5.407 × 10 ⁻¹⁴	9.881 × 10 ⁻¹	9
9	200	-10	1.030	2.376	-0.212	1.308 × 10 ⁻⁵	1.180 × 10 ⁻⁵	1.644 × 10 ⁻¹²	1.181 × 10 ⁻²	5
5	120	0	1.060	2.471	-0.210	3.221 × 10 ⁻⁶	4.144 × 10 ⁻⁶	8.517 × 10 ⁻¹³	4.960 × 10 ⁻²	7

TAB. 3.3.4 – Rang et coordonnées de points enlevés. Résultats de l'inversion de (\hat{q}, u, v) . Activités volumiques au point enlevé. Écart entre les deux activités volumiques. Enfin, le nouveau rangement des mesures, Rk_N. Vent du **nord**

Vent du nord. Pour le vent du nord la situation est un peu plus compliquée. Au départ, le modèle direct est moins bon pour le vent du nord que pour le vent du sud. Les résultats de la modélisation inverse sont aussi souvent meilleurs pour le vent du sud que pour le vent du nord. En plus, le premier essai d'appliquer cette méthode pour juger les mesures constituant le réseau se montrait douteux, la raison étant les résultats d'optimisation pour un des sous-ensembles du réseau de départ. En effet, dans le cas d'inversion sur un sous-ensemble ne comprenant pas le point $(1450, -100)$, le débit optimisé a été trois fois plus grand que le vrai débit. La méthode indique donc la mesure prise à $(1450, -100)$ comme inconsistante avec les autres mesures. Mais, ayant déjà rencontré des difficultés similaires nous avons présumé que les résultats d'inversion ne correspondaient pas au minimum absolu de la fonction coût. Après le calcul refait avec des conditions initiales modifiées, nous avons retrouvé un autre minimum de la fonction coût, cette fois-ci consistant avec les résultats pour les autres sous-ensembles. C'est ce deuxième minimum qui est reporté dans le tableau 3.3.4, page 87. De nouveau, nous avons trouvé les trois mesures conduisant au plus grand écart normalisé. Il s'agit des points de mesure localisés à $(1150, 200)$, $(200, 100)$ et $(625, 75)$. Remarquons que le réseau réduit, privé de ces trois points, a des performances pratiquement identiques à ceux du réseau de départ (comparer de nouveau le tableau B.3.23, page 155 avec le tableau B.3.3, page 150 ainsi que le tableau B.3.2, page 150 avec le tableau B.3.21, page 154).

Récapitulation : Sur la base de cette classification, des mesures le moins importantes ont été retrouvées et notées avec des croix sur la figure 2.2.3, page 47. Par conséquent, les réseaux originels de mesure ont été réduits à 7 stations pour chaque direction du vent. Des résultats de l'optimisation sur des réseaux réduits pour les deux cas ont été présentés dans le tableau B.3.21, page 154. Ils reflètent la capacité de la méthode à se débarrasser de mesures le moins compatibles avec le modèle sans qu'on perde la qualité de la reconstruction. Pour le vent du sud, l'amélioration est clairement visible sur des valeurs de la fonction coût calculées à l'aide de toutes les mesures disponibles. La valeur présentée dans le tableau B.3.22, page 155, pour le vent du sud est quasiment plus petite que n'importe quelle valeur de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$ dans tableau B.3.19, page 154. Pour le deux directions du vent le débit inversé \dot{q}^* sur le réseau de 7 mesures est très près de celui calculé pour le réseau de 10 mesures (comparer le tableau B.3.21 avec le tableau B.3.2, page 154 et page 150 respectivement).

3.4 Conclusions

Modèle direct. Le modèle direct donne une bonne description des mesures prises dans la soufflerie pour les distances supérieures à 500 m. C'est seulement autour de cette distance que les profils des mesures atteignent la forme gaussienne. Le modèle est meilleur pour le vent du sud. Pour le vent du nord, nous remarquons un important décalage entre les profils mesurés et les profils calculés dans le plan transversal par rapport à la vitesse du vent. La valeur de ce décalage augmente en fonction de la distance par rapport à la source pour atteindre 200 m à la sortie du domaine.

Paramètres. La seule valeur que nous considérons comme bonne est le débit de la source. La vitesse du vent, même si la valeur dont nous disposons est vraie au

point de mesure, n'est pas la meilleure description du comportement du panache. Son optimisation permet de diminuer l'erreur modèle. De même, nous considérons les valeurs par défaut des paramètres du modèle de Doury comme pouvant être améliorées dans le but d'une meilleure description de l'accident.

Modélisation inverse. L'inversion du débit seul sur un réseau de 10 mesures donne de très bons résultats pour le vent du sud. Ils sont de qualité inférieure pour le vent du nord mais demeurent satisfaisants. Même si l'élargissement du jeu de paramètres optimisés dégrade le plus souvent l'inversion du débit, en général ses valeurs inversées se placent près des vraies valeurs. Pour un jeu donné des paramètres, la valeur optimisée du débit est meilleure si l'inversion a eu lieu sur un réseau de 10 mesures que pour l'inversion sur toutes les mesures. On en conclut que la dégradation des résultats d'inversion du débit pourrait être le prix à payer pour trouver un meilleur accord des profils de concentration.

N_{obs}	N_{param}	Sud		Nord	
		$\dot{q}^* [\text{Bq.s}^{-1}]$	%	$\dot{q}^* [\text{Bq.s}^{-1}]$	%
Réseau de 10 (section 3.2.1)	1	0.982	-1.8	1.090	9.0
Réseau de 10 (section 3.2.2)	3	1.043	4.3	1.043	4.3
Toutes (section 3.2.3)	3	0.954	-4.6	0.802	-19.8
Réseau de 10 (section 3.2.2)	5	1.128	12.8	1.006	0.6
Toutes (section 3.2.3)	5	1.154	14.6	0.978	-2.2
Réseau de 10 (section 3.2.2)	4	1.131	13.1	1.083	8.3
Toutes les mesures (section 3.2.3)	4	1.317	31.7	1.104	10.4

TAB. 3.4.1 – Synthèse des débits inversés. Le % exprime une sous/sur-estimation, -/+, par rapport à la vraie valeur

Ajustement de la vitesse du vent et des coefficients de Doury. Pour améliorer les profils de concentration, il suffit d'optimiser les deux composantes horizontales de la vitesse du vent. L'optimisation des paramètres du modèle de Doury permet de raffiner l'accord entre les profils calculés et mesurés qui se traduit par les plus petites valeurs de la fonction coût évaluée sur toutes les mesures disponibles. Nous avons essayé de remplacer les coefficients de Doury qui sont discontinus par rapport à s_h par un coefficient continu λ_h , sans atteindre la qualité des résultats rendue par l'optimisation de A_h . On s'aperçoit dans les deux cas que le modèle direct ne diffuse pas suffisamment le polluant.

N_{obs}	N_{param}	Sud		Nord	
		$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	%	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	%
Réseau de 10 (section 3.2.2)	3	4.245×10^6	97.1	6.722×10^6	28.6
Toutes (section 3.2.3)	3	3.318×10^6	75.9	4.252×10^6	18.1
Réseau de 10 (section 3.2.2)	5	2.029×10^6	46.4	3.641×10^6	15.5
Toutes (section 3.2.3)	5	1.351×10^6	30.9	2.187×10^6	9.3
Réseau de 10 (section 3.2.2)	4	3.643×10^6	83.4	6.009×10^6	25.5
Toutes (section 3.2.3)	4	2.141×10^6	49.0	2.905×10^6	12.3

TAB. 3.4.2 – Synthèse des valeurs de la fonction coût évaluée sur toutes les mesures. J calculée avec les valeurs optimisées des paramètres, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, est affichée. Le rapport (%) de $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$ à la fonction coût calculée pour les paramètres vrais/par défaut, $J_{\text{all}}^{\text{souff}}$, est également présenté

Conditions initiales et ébauche. Bien que les valeurs initiales des paramètres ne semblent pas importantes dans le cadre de l'optimisation sans ébauche, nous avons observé, pour la vitesse v , les coefficients A_h et λ_h ainsi que le débit \dot{q} , qu'une telle influence sur les résultats d'optimisation peut se manifester, moyennant de la dépendance de l'algorithme L-BFGS-B [Byrd *et al.*, 1995] aux conditions initiales. Il en est de même quant à la dépendance aux bornes d'intervalles de variabilité d'une variable optimisée.

Réseaux de mesures. Il s'avère important de bien choisir le réseau de mesures. Deux approches de classification d'importance des points de mesure ont été testées. La première consistait en un choix des points pour lesquels l'erreur modèle - l'écart entre les sorties du modèle direct utilisé avec les paramètres de la soufflerie et les mesures - est la plus petite. Cette façon de classer les points de mesure ne permet pas de réduire leur nombre sans perte de qualité de résultats. Dans la deuxième approche il s'agissait d'ordonner des points de mesure selon leur reproductibilité par le modèle. La capacité du modèle optimisé sur un réseau de mesures privé d'un seul point à s'approcher de la mesure en ce point, évalue cette reproductibilité. L'élimination de trois points le moins bien reproductibles par le modèle conduit aux réseaux réduits qui conservent la qualité des résultats d'optimisation obtenus sur les réseaux de départ.

Réseaux très réduits. Les essais d'inversion du débit de la source ont été menés sur une seule mesure mais ils se révélaient peu concluants.

Une partie du contenu de ce chapitre a été acceptée pour publication dans la revue Atmospheric Environment, "Data Assimilation for Short-range Dispersion of Radionuclides : an Application to Wind Tunnel Data", [Krysta et al., 2006]. Les résultats présentés ici ont également contribué aux actes de colloques d'un NATO Advanced Research Workshop, ainsi que d'une conférence de l'AIEA, respectivement [Krysta et al., 2005a] et [Isnard et al., 2005].

Chapitre 4

Inversion d'une source accidentelle à l'échelle continentale

Ayant clos le chapitre sur la problématique locale, nous renouons avec l'inversion d'une source, cette fois-ci à l'échelle régionale. Nous restreignons notre attention au problème d'un rejet accidentel d'une installation nucléaire européenne et nous étudions des accidents hypothétiques dont l'origine est un mauvais fonctionnement d'un réacteur. Nous avons déjà mentionné dans le chapitre 1 que les conséquences à l'échelle régionale sont déterminées par des éléments volatiles produits par la fission du combustible. Les études effectuées ici reposent donc sur un des ces radionucléides, ^{131}I .

Le problème à résoudre est le suivant. Imaginons qu'un accident ait lieu dans un des réacteurs nucléaires en Europe. L'accident conduit à un rejet de quantités importantes de radionucléides qui sont dispersés sur le continent. Cet accident a des conséquences mesurables et le réseau d'observation fournit des mesures de la concentration d'activité. Oublions ensuite où l'accident a eu lieu, quand et quelle quantité d'activité a été émise. Sommes-nous capables de dire, sur la base de mesures collectées, où se trouvait la source, quand avait lieu l'émission et, plus finement encore, quel était le profil temporel du terme source ?

Pour un problème discret la localisation de la source se fait à une maille près. En général, la source pourrait se trouver dans n'importe quelle maille couvrant le domaine d'intérêt. Puisque nous supposons que nous savons par avance qu'elle est forcément l'un des sites nucléaires, le nombre de mailles suspectées est restreint. Il s'agit néanmoins d'un nombre de l'ordre de 100 pour la résolution choisie dans cette étude. Ensuite, l'émission peut avoir lieu à n'importe quel moment, ce qui multiplie ce chiffre par un autre facteur 100. D'autre part le nombre de mesures est limité. Par conséquent, en absence d'hypothèses fortes sur la source le problème est mal posé. Ceci le rend difficile mais pas impossible à résoudre. La possibilité de l'aborder est offert par des techniques de régularisation. Du point de vue bayésien, la régularisation doit être équivalente à la prise en compte d'une information a priori.

La question est donc de savoir comment régulariser ce problème. Nous choisissons de le régulariser à l'aide du principe du maximum d'entropie. Il s'agit de la méthode utilisée et développée récemment, [Bocquet, 2005c, Bocquet, 2005d, Bocquet, 2005a], dans le contexte de la problématique d'inversion de sources en dispersion atmosphérique.

4.1 Méthode d'inversion : maximum d'entropie

4.1.1 Description de la méthode

Un problème discret est défini sur un maillage spatio-temporel. Pour fixer les notations prenons N_s mailles spatiales et N_t pas de temps couvrant le domaine Ω . La source à inverser est un vecteur $\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{R}^N$, où $N = N_s \cdot N_t$ est la dimension de l'espace d'états.

Avant que l'inversion n'ait lieu, on peut posséder de l'information sur la source. Cette information a priori est encodée dans la densité de probabilité $\nu(\boldsymbol{\sigma})$. Ces connaissances peuvent être complétées par de nouvelles informations, conduisant à la densité de probabilité a posteriori $p(\boldsymbol{\sigma})$. Les nouvelles informations sont fournies par des mesures en conjonction avec un modèle de dispersion atmosphérique. Avant que celles-ci puissent être utilisées, il nous faut un lien entre la source et les mesures. Le lien est fourni par la modélisation physique désignée par \mathbf{H} . L'équation de la mesure pour $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^d$ s'écrit donc :

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (4.1.1)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^d$ est l'erreur de mesure (et aussi du modèle), également caractérisée par une distribution a priori $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$. Nous supposons tout au long de ce travail que les lois de probabilité sur $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}$ sont indépendantes.

La fonctionnelle qui mesure la quantité d'information présente dans la densité de probabilité a posteriori par rapport à la densité de probabilité a priori, ou la distance entre les deux, est appelée l'information de Kullback-Leibler. Elle est toujours positive, [Jaynes, 1957a, Jaynes, 1957b], et s'écrit :

$$\mathcal{K}_{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \ln \left[\frac{p(\boldsymbol{\sigma})}{\nu(\boldsymbol{\sigma})} \right] + \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} q(\boldsymbol{\varepsilon}) \ln \left[\frac{q(\boldsymbol{\varepsilon})}{\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})} \right]. \quad (4.1.2)$$

La sommation $\sum_{\boldsymbol{\sigma}}$ (ou $\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}}$), en fonction des circonstances qui imposent ce choix, est soit discrète soit continue. On va se pencher seulement sur la sommation $\sum_{\boldsymbol{\sigma}}$, $\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ étant effectuée de manière analogue. Introduisons l'espace de toutes les configurations de la source, $\mathcal{E}_{\nu} \subset \mathbb{R}^N$. En fait, la sommation parcourt tous les éléments de cet espace. Le symbole $\sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma})$ doit donc dans le cas discret être compris comme :

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \longrightarrow \sum_{\boldsymbol{\sigma}_j \in \mathcal{E}_{\nu}} p(\boldsymbol{\sigma}_j),$$

où l'indice j parcourt les éléments de l'espace de configuration (et non pas des coordonnées du vecteur $\boldsymbol{\sigma}$!). Dans le cas continu cette sommation doit être vue comme l'intégrale par rapport à la mesure $\prod_{k=1}^N d\sigma_k$ ce qui revient à :

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \longrightarrow \int_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{E}_{\nu}} \prod_{k=1}^N d\sigma_k p(\boldsymbol{\sigma}).$$

Pour s'assurer qu'il n'y ait pas d'information autre que celle fournie par les mesures, la fonction d'information $\mathcal{K}_{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}}$ doit être minimisée. Ceci équivaut à maximiser l'entropie $-\mathcal{K}_{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}}$. Le minimum est recherché sous les contraintes fournies par l'équation de mesure (4.1.1) mais vérifiée sur la moyenne donc de la forme :

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{H}\boldsymbol{\sigma} + \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} q(\boldsymbol{\varepsilon}) \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (4.1.3)$$

Le problème de minimisation sous contraintes est donc posé non pas au premier niveau (*level-1*), celui de la source et des erreurs mais au deuxième (*level-2*), celui de leurs moments. Cela revient à optimiser :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \ln \left[\frac{p(\boldsymbol{\sigma})}{\nu(\boldsymbol{\sigma})} \right] + \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} q(\boldsymbol{\varepsilon}) \ln \left[\frac{q(\boldsymbol{\varepsilon})}{\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})} \right] + \boldsymbol{\beta}^T \left(\boldsymbol{\mu} - \sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} - \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} q(\boldsymbol{\varepsilon}) \boldsymbol{\varepsilon} \right). \quad (4.1.4)$$

Dans cette formule $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^d$ est un vecteur des multiplicateurs de Lagrange, de la même dimension d que l'espace des observations. Trouver l'extremum de \mathcal{L} par rapport à $p(\boldsymbol{\sigma})$ (le passage entre $\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta})$ et $p(\boldsymbol{\sigma})$ peut être trouvé dans l'annexe C.1.1) conduit à la fonction de densité de probabilité a posteriori de la forme :

$$p(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}{\sum_{\boldsymbol{\sigma}'} \nu(\boldsymbol{\sigma}') \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}')} . \quad (4.1.5)$$

De même, la dérivation par rapport à $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$ (voir la remarque faite dans l'annexe C.1.1) donne :

$$q(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\zeta(\boldsymbol{\varepsilon}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon})}{\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}'} \zeta(\boldsymbol{\varepsilon}') \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon}')} . \quad (4.1.6)$$

Ensuite, on introduit la notion de fonction de partition et on la définit en s'appuyant sur des connaissances a priori concernant la source et les erreurs donc sur $\nu(\boldsymbol{\sigma})$ et $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$ respectivement :

$$Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}) \quad \text{et} \quad Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\boldsymbol{\varepsilon}} \zeta(\boldsymbol{\varepsilon}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon}) . \quad (4.1.7)$$

Ayant introduit la fonction de partition nous pouvons réécrire les expressions (4.1.5) et (4.1.6) comme :

$$p(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}{Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta})} \quad \text{et} \quad q(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\zeta(\boldsymbol{\varepsilon}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon})}{Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta})} . \quad (4.1.8)$$

En utilisant les résultats de minimisation de $\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta})$ par rapport à $p(\boldsymbol{\sigma})$ et $q(\boldsymbol{\varepsilon})$ (le calcul se trouve dans l'annexe C.1.2) nous réécrivons la formule (4.1.4) sous la nouvelle forme :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}) = -\ln Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta}) - \ln Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu} . \quad (4.1.9)$$

Il nous reste à le maximiser par rapport à $\boldsymbol{\beta}$. Nous "remplaçons" ce problème par la minimisation (noter le changement de signe devant $\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta})$) de :

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = -\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}) = \ln Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta}) + \ln Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta}) - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu} , \quad (4.1.10)$$

et introduisons ainsi le problème dual de celui de minimisation de $\mathcal{K}_{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}}$ sous contraintes (4.1.3). Dès qu'on dispose des solutions du problème de minimisation, on est capable d'exprimer $p(\boldsymbol{\sigma})$ et $q(\boldsymbol{\varepsilon})$ en fonction des densités de probabilité a priori $\nu(\boldsymbol{\sigma})$ et $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$. Remarquons qu'en procédant de cette façon nous avons remplacé le problème de minimisation dans l'espace de grande dimension N , par un problème de minimisation dans l'espace d'observation de dimension $d \ll N$.

Finalement, la solution au problème, donc la source reconstruite $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ ainsi que les erreurs reconstruites $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ s'expriment à l'aide des estimateurs statistiques. Dans ces travaux l'estimateur utilisé est la valeur moyenne qui s'écrit :

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) \boldsymbol{\sigma} , \quad (4.1.11)$$

et qui a une propriété souhaitée de vérifier l'équation de mesure (4.1.1). Plus précisément, pour la k_0 -ème maille l'estimateur de la source reconstruite s'écrit :

$$\begin{aligned}\bar{\sigma}_{k_0} &= P_{k_0} \frac{\sum_{\sigma} \sigma \nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma}(\beta)} \\ &= P_{k_0} \frac{\sum_{\sigma_{k_0}} \sigma_{k_0} \nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma}(\beta)}.\end{aligned}\quad (4.1.12)$$

En lisant cette formule attentivement nous remarquons que $\bar{\sigma}_{k_0}$ à gauche signifie la composante k_0 de la source reconstruite. Tandis que, σ_{k_0} à droite se réfère à un ensemble des configurations potentiels dont uniquement la composante $k_0 = (l_0 - 1) \cdot N_t + n_0$ est non-nulle. L'opérateur P_{k_0} projet un vecteur sur sa k_0 -ème composante.

L'estimateur des erreurs s'écrit de manière analogue :

$$\bar{\varepsilon} = \sum_{\varepsilon} q(\varepsilon) \varepsilon. \quad (4.1.13)$$

4.1.2 L'influence de l'information a priori

Un rejet accidentel des radionucléides possède des caractéristiques qui font que l'information a priori le concernant est très différente de celle caractérisant d'autres polluants dispersés dans l'atmosphère. Bien qu'on ne possède pas d'information a priori sur la quantité émise, le débit du rejet ni sur la localisation d'une source, l'accès à de l'information préalable à l'inversion n'est pas exclu. Cette information se réfère avant tout à la positivité de la source. Remarquons que ceci n'est pas nécessairement le cas pour d'autres espèces, comme CO_2 par exemple, pour lequel des puits sont aussi importantes que des sources [Fan *et al.*, 1999, Kaminski *et al.*, 1999b, Rayner *et al.*, 1999, Bousquet *et al.*, 2000]. Pour l'imposer [Robertson et Langner, 1997] on effectue un changement des variables qui représente le débit comme carré d'une variable auxiliaire avec laquelle ils travaillent par la suite. Dans [Politis et Robertson, 2004] elle est imposée dans la fonction coût de l'approche variationnelle standard (voir section 1.6.1) par le biais d'un terme supplémentaire. [Bocquet, 2005a] a montré son utilité dans le problème de reconstruction des sources en faisant une comparaison d'inversion sans (densité de probabilité gaussienne) et avec la condition de positivité.

L'information a priori sur le problème, en conjonction avec le maillage sous-jacent influe sur la forme des fonctionnelles minimisées. L'interdépendance entre les mailles ou son absence, font partie des connaissances a priori. Ces informations sont reflétées dans des formes particulières des fonctions de densité de probabilité.

Tournons maintenant notre attention vers une k -ème maille. En général, il y a deux possibilités de comportement de cette maille, soit elle émet - masse m , soit elle ne le fait pas. Une telle situation est très bien décrite par la loi de probabilité de Bernoulli :

$$\nu(\sigma_k) = \begin{cases} \gamma_k & \text{si } \sigma_k = m \\ 1 - \gamma_k & \text{si } \sigma_k = 0 \end{cases}, \quad (4.1.14)$$

où σ_k désigne la composante du vecteur σ dans la k -ème cellule. En pratique ceci veut dire que la source est bornée par m dans toute maille et que l'émission dans la k -ème maille intervient avec une probabilité γ_k . Cette approche a l'avantage d'être simple - seulement deux options pour la source σ_k et de prendre en compte la positivité de la source. Dans le cas d'accident la probabilité d'émission par une maille est petite et

par conséquent γ_k est petit. La loi de Bernoulli est proposée en conformité avec des résultats de [Bocquet, 2005d] où il a été montré que des densités de probabilité non-linéaires peuvent améliorer les résultats d'inversion. L'amélioration est visible dans des cas où le premier moment de la distribution a priori n'est pas connu comme dans le cas d'un rejet accidentel. D'autres distributions sont néanmoins possibles et, en particulier la distribution de Poisson a été étudiée en parallèle de la distribution de Bernoulli et de Gauss dans [Bocquet, 2005c, Bocquet, 2005d].

Ayant décrit la situation dans une maille, nous nous tournons vers des dépendances des mailles entre elles. Nous proposons d'étudier les trois situations suivantes.

Source délocalisée

Dans un premier temps imaginons une source qui émet dans une ou plusieurs mailles spatiales pendant un ou plusieurs pas de temps. Cette source n'est soumise à aucun confinement spatio-temporel et elle est donc délocalisée. Dans cette configuration ce qui se passe dans une maille est indépendant de ce qui se passe dans n'importe quelle autre maille. Grâce à cet indépendance la fonction de partition pour la totalité du maillage s'exprime comme produit des contributions pour chaque maille. Nous avons donc :

$$Z_{\sigma}(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{k=1}^N Z_k(\boldsymbol{\beta}), \quad (4.1.15)$$

où

$$Z_k(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{\sigma_k} \nu(\sigma_k) \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k \sigma_k), \quad (4.1.16)$$

et où la somme \sum_{σ_k} parcourt les composantes de σ dans la k -ème maille. Remarquons, qu'il n'est pas nécessaire que toute maille soit décrite par la même loi a priori : ν dépendant de k , n'empêche pas la factorisation d'avoir lieu.

Dans le cas de la distribution de Bernoulli, (4.1.14), nous avons :

$$\begin{aligned} Z_k(\boldsymbol{\beta}) &= (1 - \gamma_k) \cdot \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k \cdot 0) + \gamma_k \cdot \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k m) \\ &= 1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k), \end{aligned} \quad (4.1.17)$$

et la fonction coût correspondante s'écrit :

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{k=1}^N \ln [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)] - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}. \quad (4.1.18)$$

Une telle description est valable pour une source diffuse mais une source accidentelle serait selon toute vraisemblance ponctuelle. Pour inverser un rejet accidentel nous proposons ci-dessous des informations a priori plus contraignantes.

Source localisée

Dans un cas accidentel il est réaliste de supposer que le rejet ait lieu sur un seul site. L'émission est donc restreinte à une maille spatiale, sans nécessairement être instantanée. Dans un deuxième temps nous proposons donc une loi de probabilité a priori qui reflète une telle configuration et prescrit dans sa forme mathématique la condition suivante : si l'émission a lieu dans une maille spatiale, elle ne peut survenir dans aucune

autre maille. La situation dans toute maille spatiale est donc étroitement liée et s'exprime à l'aide de la somme des contributions de ces mailles, $\sum_{l=1}^{N_s}$. Néanmoins, pour une maille spatiale donnée, l'émission peut s'étendre sur plusieurs pas de temps. Et ce qui se passe à l'instant donné est indépendant de ce qui intervient dans la maille donnée à tous les autres instants, l'indépendance étant exprimée par le produit des contributions.

En conséquence, pour certains types d'accident de durée plus importante que le pas de temps d'inversion (l'accident à Tchernobyl en est un exemple), nous arrivons à la forme suivante de la fonction de partition :

$$\begin{aligned} Z_{\sigma}(\beta) &= \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} Z_k(\beta) \\ &= \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} \nu(\sigma_k) \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k \sigma_k) \\ &= \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] , \end{aligned} \quad (4.1.19)$$

où l'indice k étant une combinaison des indices l et n , $k = (l-1) \cdot N_t + n$, parcourt toutes les mailles spatio-temporelles. Dans cette formule nous avons supposé la description du comportement de toute maille selon la loi de Bernoulli de paramètres γ_k et m , (4.1.14). Pour compléter la présentation nous donnons ici la forme de la fonction coût associée :

$$\Psi(\beta) = \ln \left[\sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] \right] - \beta^T \boldsymbol{\mu} . \quad (4.1.20)$$

Source localisée et instantanée

Si, en plus, on sait que le rejet accidentel a été court en comparaison du pas de temps d'inversion, on peut imaginer qu'il soit restreint à une seule maille spatio-temporelle. C'est le cas de l'incident à Algésiras par exemple (voir sections 1.2.2 et 2.3.5). Dans ces circonstances ça ne fait aucun sens de descendre en fréquence en dessous d'une heure pour la reconstruction d'une source à l'échelle d'un continent. La source peut être considérée comme instantanée.

Le rejet n'étant possible que dans une maille, nous avons à faire à une forte corrélation entre elles. Aucune factorisation de la fonction de partition n'étant possible, nous nous retrouvons dans un cas particulier de la situation précédente - le produit sur les pas de temps étant transposé en une somme.

Il y a $N + 1$ sources potentielles dans ce cas. Il y en a N qui correspondent chacune à l'émission dans une de N mailles. La probabilité d'émettre la masse m dans la k -ème cellule est γ_k/N . Et il y a aussi la source nulle dont la probabilité est égale à $1 - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \gamma_k$. Ces informations définissent $\nu(\sigma)$ entièrement conduisant à la densité de probabilité qui est ainsi correctement normalisée. Remarquons qu'elle ne se factorise pas puisque les mailles ne sont pas indépendantes. Par conséquent :

$$\begin{aligned} Z_{\sigma}(\beta) &= \left(1 - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \gamma_k \right) \cdot \exp(0 \cdot [\beta^T \mathbf{H}]_k) + \sum_{k=1}^N \frac{\gamma_k}{N} \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] . \end{aligned} \quad (4.1.21)$$

La fonction coût qui découle des hypothèses faites dans cette section s'écrit :

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \ln \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)] \right] - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}. \quad (4.1.22)$$

4.1.3 Estimateurs de sources

Les trois situations physiques décrites dans la section précédente conduisent à différentes formes mathématiques des estimateurs de sources. Dans le cas d'une source délocalisée, l'estimateur de la source dans la k_0 -ème maille prend la forme (le calcul peut être trouvé dans l'annexe C.2, formule (C.2.2)) :

$$\bar{\sigma}_{k_0} = \frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}{1 - \gamma_{k_0} + \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}. \quad (4.1.23)$$

Si nous avons à faire à une source localisée, nous obtenons pour la k_0 -ème maille, $k_0 = (l_0 - 1) \cdot N_t + n_0$, l'estimateur correspondant. Il est obtenu, comme le précédent, à la base de l'expression générale pour l'estimateur de la source, équation (4.1.12), et s'exprime par (formule (C.2.3) dans l'annexe C.2) :

$$\bar{\sigma}_{k_0} = \frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}{1 - \gamma_{k_0} + \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})} \frac{\prod_{n=1}^{N_t} \{1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)\}}{\sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}. \quad (4.1.24)$$

Et finalement pour la troisième configuration a priori, celle qui se réfère à une source localisée et instantanée, l'estimateur de la source reconstruite s'écrit (formule (C.2.4)) :

$$\bar{\sigma}_{k_0} = \frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}{\sum_{k=1}^N 1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)}. \quad (4.1.25)$$

4.1.4 Modélisation d'erreurs

Dans le cadre de ce travail avec l'entropie nous sommes également capables d'inclure des erreurs dans le procédé d'inversion, voir [Bocquet, 2005d]. Si l'information a priori concernant les sources est indépendante de l'information a priori concernant les erreurs, les fonctions de partitions associées à ces quantités sont multiplicatives. L'information a priori de forme gaussienne est dans la plupart des cas suffisante. Si donc la loi a priori est gaussienne :

$$\zeta(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d \det \mathbf{R}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}\right). \quad (4.1.26)$$

avec une matrice de covariance \mathbf{R} , la fonction de partition d'erreurs peut être calculée selon (voir le calcul de $Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta})$ dans le cas gaussien et un commentaire concernant le calcul de $Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta})$ dans l'annexe C.3) :

$$Z_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\beta}) = \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}\right). \quad (4.1.27)$$

Nous pouvons également calculer l'estimateur des erreurs (toujours l'annexe C.3.1) selon :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}. \quad (4.1.28)$$

4.1.5 Lien avec l'approche 4D-Var

L'assimilation de données en géophysique s'appuie sur des a priori gaussiens conduisant à l'approche connue sous le nom de 4D-Var. Nous avons à présent introduit une fonction de densité de probabilité a priori définie par la loi de Bernoulli. Pour pouvoir replacer la méthode présentée ici dans le contexte plus large de l'assimilation de données, nous montrons le lien avec 4D-Var. Revenons à l'information a priori concernant la source, mais prenons-la de forme gaussienne :

$$\nu(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma}\right). \quad (4.1.29)$$

L'information concernant l'interdépendance des mailles est contenue dans la matrice de corrélation \mathbf{B} . Si on suppose en plus des erreurs de forme gaussienne (4.1.26), la fonction coût à minimiser (4.1.10) devient (voir l'annexe C.3) :

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}^T (\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R}) \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}, \quad (4.1.30)$$

ce qui n'est rien d'autre que le système d'assimilation de données PSAS, [Courtier, 1997].

Remarquons que l'entropie secondaire ci-dessus se traduit par l'entropie dans l'espace des sources de la forme :

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \quad (4.1.31)$$

ce qui est tout simplement un terme de régularisation de Tikhonov du 4D-Var habituel.

4.1.6 Score d'inversion

Nous avons proposé d'inverser une source à l'aide de la méthode découlant du principe du maximum d'entropie. Nous avons également introduit trois fonctionnelles correspondantes à une richesse croissante de l'information a priori. Pour pouvoir tester leur performance et effectuer des comparaisons, nous avons besoin d'un indicateur de la qualité de reconstruction.

À présent nous allons renverser le raisonnement des sections précédentes et en s'appuyant sur un tel indicateur introduit dans un cas gaussien nous allons la généraliser aux cas d'autres densités de probabilité a priori [Bocquet, 2005a]. L'indicateur en question pourrait être l'erreur quadratique moyenne par rapport à la vraie source. Grâce à l'identité triangulaire il se décompose en un terme qui dépend exclusivement de la source reconstruite et un autre qui dépend de la vraie source.

Imaginons donc le cas d'un modèle et d'observations parfaits où le problème de la reconstruction se réfère uniquement à la source. Prenons la vraie source $\boldsymbol{\sigma}_t$ et la source reconstruite $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$. L'indicateur de la qualité de reconstruction peut être la distance entre la source reconstruite $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ et la vraie source $\boldsymbol{\sigma}_t$:

$$\|\boldsymbol{\sigma}_t - \bar{\boldsymbol{\sigma}}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2, \quad (4.1.32)$$

où la notation utilisée est à comprendre selon $\|\mathbf{x}\|_{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ (voir section 1.5.1). Il est caractérisé par $\|\boldsymbol{\sigma}_t - \bar{\boldsymbol{\sigma}}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 \rightarrow 0$ lorsque la source reconstruite $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$ approche la vraie source $\boldsymbol{\sigma}_t$ donc lorsque la reconstruction s'améliore. En se plaçant dans le cas décrit par la distribution gaussienne de la matrice de covariance \mathbf{B} , (4.1.29), nous pouvons écrire :

$$\|\boldsymbol{\sigma}_t - \bar{\boldsymbol{\sigma}}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 = \|\boldsymbol{\sigma}_t\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 - \|\bar{\boldsymbol{\sigma}}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2. \quad (4.1.33)$$

Remarquons que la reconstruction est d'autant meilleure que $\|\sigma_t - \bar{\sigma}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 \rightarrow 0$ donc que $\|\bar{\sigma}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2$ est plus grand. On peut donc proposer, [Bocquet, 2005a], le score qui s'écrit comme le ratio :

$$\rho = \frac{\|\bar{\sigma}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2}{\|\sigma_t\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2} = \frac{\bar{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \bar{\sigma}}{\sigma_t^T \mathbf{B}^{-1} \sigma_t}. \quad (4.1.34)$$

Les valeurs du score varient entre 0 qui correspond à une reconstruction ayant échoué et 1 qui décrit une reconstruction parfaite, en conformité avec la croissance des valeurs de $\|\bar{\sigma}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2$ pour de meilleures reconstructions.

Le score peut servir deux buts. Dans un premier temps, pour des expériences jumelles effectuées sur des mesures parfaites, le score mesure la distance entre la source reconstruite est la vraie source, connue dans ce cas. Dans un deuxième temps, pour des reconstructions sur des vraies mesures (où la vraie source n'est pas connue), le score permet d'évaluer l'influence des connaissances a priori différentes ou de l'addition d'observations supplémentaires sur la reconstruction.

Dans le deuxième temps nous allons modifier la formule (4.1.34) et y ajouter des termes liés à l'erreur ε :

$$\rho = \frac{\bar{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \bar{\sigma} + \bar{\varepsilon}^T \mathbf{R}^{-1} \bar{\varepsilon}}{\sigma_t^T \mathbf{B}^{-1} \sigma_t + \varepsilon_t^T \mathbf{R}^{-1} \varepsilon_t}, \quad (4.1.35)$$

où ε_t et $\bar{\varepsilon}$ représentent les erreurs, vraies et reconstruites respectivement.

Par contre, il a été observé dans [Bocquet, 2005a] que dans les cas des a priori non-gaussiens, que l'identité triangulaire (4.1.33) n'est pas valide. L'erreur quadratique moyenne peut être remplacée par le score qui dépend de densités de probabilité a priori $\nu(\sigma)$ et $\zeta(\varepsilon)$, et qui s'écrit :

$$\rho = \frac{\mathcal{K}_{\bar{\sigma}, \bar{\varepsilon}}(\beta)}{\mathcal{K}_{\sigma_t, \varepsilon_t}(\beta)} \quad (4.1.36)$$

ou autrement dit :

$$\rho = \bar{\Psi} / \Psi_t. \quad (4.1.37)$$

$\bar{\Psi}$ est la valeur de Ψ au minimum qui correspond à l'entropie de la source et des erreurs reconstruites et qui est obtenue numériquement en fin de minimisation. Le dénominateur consiste en l'entropie de la vraie source et des vraies erreurs et il n'est pas nécessairement accessible. La section suivante est consacrée aux possibilités d'y accéder par le biais d'un problème de minimisation équivalent à celui de minimisation de la fonctionnelle de Kullback-Leibler.

4.1.7 L'entropie relative d'une vraie source

Si on voulait calculer l'entropie relative de la vraie source en utilisant l'équation (4.1.2), il serait nécessaire de disposer de la loi de probabilité a posteriori, $p(\sigma_t)$. Cette voie étant impossible à explorer de manière générale, nous nous appuyons sur une formulation alternative du problème pour calculer Ψ_t . La formulation alternative est une généralisation du fait dont nous avons déjà parlé dans la section 4.1.5. Il s'agit d'exploiter et généraliser le fait que, pour la loi de probabilité a priori de forme gaussienne, l'entropie relative de la source reconstruite $\|\bar{\sigma}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2$ coïncide, à un facteur multiplicatif près, avec le terme de régularisation de Tikhonov du 4D-Var standard, (4.1.31), pour la même source.

La formulation alternative, [Bocquet et Krysta, 2005], consiste à construire une autre fonctionnelle, \mathcal{J} , opérant sur les sources σ (et les erreurs ε mais nous nous

restreignons aux sources dans cette section) et non pas sur leurs densité de probabilité comme c'est le cas de l'information de Kullback-Leibler, (4.1.2). La minimisation de $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma})$ conduira au même problème dual de minimisation de $\Psi(\boldsymbol{\beta})$, (4.1.10), que la minimisation de $\mathcal{K}_{\boldsymbol{\sigma}}$. Au minimum, qui correspond à la solution du problème, donc pour la source et les erreurs reconstruites, les trois fonctionnelles coïncideront :

$$\mathcal{K}_{\bar{\boldsymbol{\sigma}}} = -\min_{\boldsymbol{\beta}} \Psi(\boldsymbol{\beta}) = \mathcal{J}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}). \quad (4.1.38)$$

$\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma})$ est définie par l'enchaînement de deux transformées des lois de probabilité a priori. Il s'agit de prendre d'abord la transformée log-Laplace :

$$\hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha}) = \ln \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha}), \quad (4.1.39)$$

et dans un deuxième temps d'effectuer la transformée de Legendre-Fenchel de $\hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha})$ selon :

$$\hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma}) = \max_{\boldsymbol{\alpha}} (\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha})). \quad (4.1.40)$$

La minimisation de \mathcal{J} définie par $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) = \hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma})$ est effectuée sous les contraintes imposées par l'équation de mesure (4.1.1) au premier niveau.

L'égalité (4.1.38) étant vraie pour toutes source et erreurs qui vérifient les contraintes (soit (4.1.1), soit (4.1.3)), elle reste valide donc en particulier pour la vraie source et les vraies erreurs.

Quel est l'avantage d'introduire le problème alternatif? Il offre la possibilité de calculer l'entropie de la vraie source en s'appuyant sur la forme la plus accessible, celle de $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}_t) = \Psi_t$.

Le passage entre les densités de probabilité a priori qui correspondent aux trois cas introduits dans la section 4.1.2 et les fonctionnelles \mathcal{J} correspondantes se trouve dans l'annexe C.4. Ainsi, l'entropie d'une source $\boldsymbol{\sigma}$, solution du problème d'optimisation pour la fonctionnelle délocalisée s'exprime :

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} + \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{\sigma_k}{m}\right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m}\right) - N \ln(1-\gamma). \quad (4.1.41)$$

Nous pouvons accéder aussi à l'entropie de la source pour la loi a priori décrivant une source localisée et instantanée :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) &= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln N + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} \\ &+ \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m}\right) \ln \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m}\right) - \ln(1-\gamma). \end{aligned} \quad (4.1.42)$$

Il n'est pas possible par contre d'obtenir la forme $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma})$ pour la fonctionnelle localisée. Nous sommes néanmoins capables d'y arriver si la vraie source est localisée et ponctuelle, le résultat que nous présenterons et dont nous allons nous servir dans la section 4.4.

Remarquons enfin que pour les erreurs qui tout au long de ces travaux sont supposées être décrites par la loi gaussienne :

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\varepsilon}_t) = \frac{1}{2} \|\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_t\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2, \quad (4.1.43)$$

de façon analogue à la forme (4.1.31) obtenue pour la source a priori décrite par la loi gaussienne.

4.2 Modèle adjoint

Le problème inverse consiste à reconstruire la source d'un rejet radioactif, sachant des mesures μ_i , où $i \in \{1, \dots, d\}$. Nous avons déjà introduit l'équation de la mesure (4.1.1) et l'opérateur \mathbf{H} formant un lien entre la source σ et les mesures μ . Pour la clarté de la présentation nous nous plaçons dans une situation parfaite et omettons pour l'instant l'erreur ε .

L'équation de mesure permet de remarquer que dans sa représentation matricielle l'opérateur \mathbf{H} a d colonnes et N lignes. Chaque colonne de \mathbf{H} peut être calculée en résolvant l'équation d'advection-diffusion (2.1.1) pour une source représentée par un vecteur de la base canonique de l'espace \mathbb{R}^N . Mais une autre façon de calculer \mathbf{H} existe. Pour cela il faut procéder ligne par ligne, la i -ème ligne étant la solution de l'équation adjointe pour une fonction d'échantillonnage π_i liée à la i -ème mesure. L'opérateur qui relie les mesures et la source est alors défini par des solutions adjointes associées aux mesures effectuées :

$$[\mathbf{H}]_{i,k} = c_{i,k}^*, \quad (4.2.1)$$

où k parcourt toutes les mailles $k \in \{1, \dots, N\}$. Il nous faut donc définir l'équation adjointe. D'abord, nous introduisons cette notion dans la formulation continue et ensuite dans la formulation discrète du problème de dispersion.

Des avantages liés à l'utilisation des solutions du modèle adjoint (appelées fonctions d'influence ou fonctions de sensibilité) pour analyser la sensibilité des modèles par rapport aux paramètres sont exposés dans [Marchuk et Penenko, 1979]. Des équations adjointes de modèles simples de la thermo- et hydrodynamique ont été construites dans [Kontarev, 1980]. L'utilisation des solutions adjointes dans le domaine de la pollution atmosphérique a été proposée par [Uliasz, 1983]. Il s'agit donc du premier cas de la construction explicite des solutions adjointes de l'équation d'advection-diffusion du type (2.1.1). Dans [Kontarev, 1980, Uliasz, 1983] des travaux antérieurs de Marchuk disponibles en langue russe sont cités abondamment.

Plus tard [Uliasz, 1987, Uliasz et Pielke, 1991] se concentrent sur la relation source-récepteur et soulignent des avantages de l'approche consistant à évaluer la pollution en s'appuyant sur des solutions des équations adjointes. Parmi les travaux inspirés par la dispersion des radionucléides [Pudykiewicz, 1998, Hourdin *et al.*, 2006] font appel aux équations adjointes. Dans [Kaminski *et al.*, 1999a] elles sont utilisées dans le cadre de l'inversion des sources de CO_2 . L'assimilation de données et la modélisation inverse pour la qualité d'air qui fait intervenir des espèces réactives fait aussi appel aux techniques adjointes qui, à cause de non-linéarités, prennent des formes différentes [Elbern et Schmidt, 1999, Elbern *et al.*, 2000].

4.2.1 L'introduction du problème continu

L'équation de mesure

Des mesures d'activité volumique, μ_i , $i \in \{1, \dots, d\}$, sont formalisées à l'aide de l'équation :

$$\mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \pi_i(\mathbf{x}, t) c(\mathbf{x}, t), \quad (4.2.2)$$

qui est écrite ici dans sa formulation primale avec c désignant une concentration et π_i une fonction d'échantillonnage. Ω est un domaine spatio-temporel et se décompose en $\Omega = \mathcal{D} \times [0, \tau]$, où \mathcal{D} est le domaine spatial et $[0, \tau]$ l'intervalle de temps de l'expérience. π_i décrit la manière de prendre une mesure. Même si par la suite on se restreint à l'activité volumique d'une espèce, d'autres types de mesure peuvent être décrits avec ce formalisme. Ainsi π_i reflète l'extension spatiale et temporelle en distinguant entre une quantité instantanée, moyenne ou accumulée. Il peut également s'agir de la concentration de plusieurs espèces, du flux de lessivage et/ou du dépôt sec, comme par exemple dans [Roustan et Bocquet, 2005], ou encore d'une dose.

Pour que μ_i représente en effet la concentration locale, nous devons imposer à la fonction d'échantillonnage :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \pi_i(\mathbf{x}, t) = 1.$$

Méthodes adjointes

Introduisons un champ test $\phi(\mathbf{x}, t)$ par lequel on multiplie l'équation de transport (2.1.1). On l'intègre ensuite sur tout le domaine Ω :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi \cdot \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) - \lambda c - \sigma \right) = 0. \quad (4.2.3)$$

En effectuant l'intégration par parties (voir le calcul dans l'annexe C.5) et prenant en compte des conditions aux bords sur c , nous avons :

$$0 = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \left(-\frac{\partial \phi}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{u}\phi) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla \phi) - \lambda \phi \right) - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi \sigma \quad (4.2.4)$$

$$+ \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} c(\tau) \phi(\tau) \quad (4.2.5)$$

$$- \int_{\partial \mathcal{D} \times [0, \tau]} dt d\mathbf{S} \cdot (c\mathbf{K}\nabla \phi - \phi\mathbf{K}\nabla c) \quad (4.2.6)$$

$$+ \int_{\partial \Omega_-} dt d\mathbf{S} \cdot (\phi c \mathbf{u}), \quad (4.2.7)$$

où $\partial \mathcal{D}$ est le bord du domaine spatial et $\partial \Omega_-$ dénote une partie de la frontière du domaine qui correspond au champ sortant.

Nous cherchons maintenant à construire l'équation adjointe de la manière suivante. Nous voulons éliminer la solution c du modèle (2.1.1), et y introduire la mesure μ_i , définie par l'équation (4.2.2). Considérons une mesure μ_i et la fonction d'échantillonnage π_i qui correspond à cette mesure. En s'inspirant de l'équation (4.2.4), nous définissons l'équation adjointe selon :

$$-\frac{\partial c_i^*}{\partial t} - \operatorname{div}(\mathbf{u} c_i^*) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla (c_i^*)) - \lambda c_i^* = \pi_i, \quad (4.2.8)$$

où c_i^* désigne la solution adjointe. Ils demeurent d'autres termes dans l'équation (4.2.4) qu'on aimerait éliminer. Nous le faisons en choisissant le flux diffusif :

$$(\mathbf{K}\nabla c_i^*) \cdot \mathbf{n} = v_d c_i^* \quad (4.2.9)$$

au sol et le flux nul sur d'autres facettes ainsi que :

$$c_i^*(\mathbf{x}, \tau) = 0 \quad \forall \mathbf{x}; \quad c_i^*(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_- . \quad (4.2.10)$$

Remarquons que la condition (2.1.4) conjointement avec (4.2.9) mettent le terme (4.2.6) à zéro. La condition au bord (4.2.10) garanti que le terme (4.2.5) s'annule et la condition au bord résulte en nullité du terme (4.2.7).

De cette manière nous avons entièrement défini la solution adjointe c_i^* , appelée *rétropanache* dans ce contexte. L'équation (4.2.4) devient :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c(\mathbf{x}, t) \pi(\mathbf{x}, t) = \mu_i = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \sigma(\mathbf{x}, t) c_i^*(\mathbf{x}, t) . \quad (4.2.11)$$

4.2.2 Problème discret

Il faut être conscient que la manipulation des équations continues ne correspond pas précisément au problème qu'on aborde ici. Le problème est posé et ensuite résolu numériquement dans sa formulation discrète. C'est avec cette formulation qu'on va procéder par la suite.

Les résultats présentés ci-dessus pour le modèle continu peuvent être transposés sur le modèle discret. Le domaine Ω se décompose en Ω_k et, de même, le champ de concentration c se discrétise en c_k , $k \in \{1, \dots, N\}$. Les intégrales sur le domaine Ω sont remplacés par des sommations sur les mailles.

Problème inverse discret

Le vecteur d'activités volumiques \mathbf{c} ayant une composante pour chaque isotope se discrétise selon le maillage sous-jacent. Par conséquent l'équation de mesure, (4.2.2), se discrétise selon :

$$\mu_i = \sum_{k=1}^N \Delta_t \langle \pi_{i,k}, \mathbf{c}_k \rangle , \quad (4.2.12)$$

où \mathbf{c}_k est un vecteur des activités volumiques dans la i -ème maille. Dans cette équation il s'agit de deux produits scalaires. Le produit scalaire \langle , \rangle agit dans l'espace des isotopes de dimension N_{iso} . La somme sur k et le pas de temps Δ_t entraînent le produit scalaire implicite dans l'espace des états. Sachant la dimension physique des champs et des mesures (\mathbf{c} en Bq.m^{-3} , Δ_t en s, et μ_i en Bq.m^{-3}), on peut dériver la dimension du champ auxiliaire : π_i s'exprime en s^{-1} . Quand on prend en compte des radionucléides dont les descendants sont stables, ce qui est le cas de ^{131}I dont le fils ^{131}Xe est stable, nous avons besoin d'une seule composante de \mathbf{c} . Dans ce cas l'équation de mesure (4.2.12) s'écrit :

$$\mu_i = \sum_{k=1}^N \Delta_t \pi_{i,k} c_{i,k} . \quad (4.2.13)$$

Lien entre les activités et la source

En reformulant l'équation (2.1.1) on exprime la manière dont un CTM (modèle de chimie-transport) agit comme un opérateur sur les champs d'activités volumiques :

$$\mathbf{c}_{n+1} = \mathbf{c}_n + \Delta t \mathbf{A}_n \cdot \mathbf{c}_n + \Delta t \boldsymbol{\sigma}_n. \quad (4.2.14)$$

L'indice n parcourt le temps. \mathbf{A}_n est l'opérateur spatial du CTM correspondant à un pas de temps. Dans le cas des traceurs passifs ou de radionucléides il agit, au moins approximativement, linéairement sur \mathbf{c}_n . $\boldsymbol{\sigma}_n$ est le champ source qui émet à un instant indiqué par n .

Prenons le produit scalaire de l'équation avec le champ test ϕ_n . Remarquons qu'il y a de nombreux produits scalaires qui, employés, conduiraient chacun à une autre solution adjointe. Puisque l'approche présentée ici envisage l'utilisation d'un différenciateur automatique, Odyssée [Faure et Papegay, 1998] nous choisissons le produit scalaire implicitement employé par ce logiciel. Il s'agit nécessairement du même produit scalaire que celui utilisé par l'équation de mesure (4.2.12).

Dans l'espace géométrique le produit scalaire le plus simple est le produit scalaire canonique qui donne :

$$\sum_{l,n} \langle \phi_n, \mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n - \Delta t \mathbf{A}_n \cdot \mathbf{c}_n - \Delta t \boldsymbol{\sigma}_n \rangle = 0, \quad (4.2.15)$$

La sommation parcourt toutes les mailles spatiales l en tous les instants n mais l'indice l a été omis dans l'équation pour la clarté de la présentation. Puisqu'il s'agit d'un important rejet accidentel de radioactivité, il n'y a pas de contribution de fond et par conséquent la condition initiale est $\mathbf{c}_1 = \mathbf{0}$. Les conditions aux bords sont également choisies nulles. En effet, au début de la simulation il n'y pas de flux entrant parce qu'il n'y a pas de radionucléides dans le domaine ni en dehors de celui-ci. Il n'y a pas de flux sortant non plus parce que le nuage est éloigné de bords. Les flux ne participent donc pas dans le calcul ci-dessous qui est détaillé dans l'annexe C.6 et qui donne :

$$\sum_{l,n} \langle \mathbf{c}_n, \phi_{n-1} - \phi_n - \Delta t \mathbf{A}_n^T \cdot \phi_n \rangle = \sum_{l,n} \Delta t \langle \phi_n, \boldsymbol{\sigma}_n \rangle. \quad (4.2.16)$$

Toutefois, comme dans le cas continu, l'exception étant le flux sur la face inférieure du domaine qui englobe la vitesse de dépôt. Il conduit à l'apparition d'un terme non-nul qui est un produit de la vitesse de dépôt par les champs \mathbf{c}_n et ϕ_n . Ce terme peut être enlevé en imposant, sur la même face, le flux diffusif pour le champ ϕ_n déterminé par la même vitesse de dépôt.

Si on impose la solution adjointe comme solution de :

$$\mathbf{c}_{i,n-1}^* = \mathbf{c}_{i,n}^* + \Delta t \mathbf{A}_n^T \cdot \mathbf{c}_{i,n}^* + \Delta t \boldsymbol{\pi}_{i,n}, \quad (4.2.17)$$

nous remarquons qu'elle coïncide avec ϕ_n . $\boldsymbol{\pi}_{i,n}$ est associée à la définition de l'observation sur le i -ème site (voir équation(4.2.12)). Des conditions aux bords et les conditions initiales sont choisies nulles pour \mathbf{c}_i^* . Ensuite, l'équation (4.2.16) devient :

$$\sum_{l,n} \Delta t \langle \mathbf{c}_n, \boldsymbol{\pi}_{i,n} \rangle = \mu_i = \sum_{l,n} \Delta t \langle \mathbf{c}_{i,n}^*, \boldsymbol{\sigma}_n \rangle, \quad (4.2.18)$$

qui est une relation de dualité établissant le lien entre le champ direct et adjoint. Les deux termes dans la relation ci-dessus sont égaux à la mesure μ_i sur le site i . Nous en déduisons les dimensions des champs auxiliaires : \mathbf{c}_i^* est sans dimension.

En conclusion, le problème inverse est défini par l'équation :

$$\mu_i = \sum_{k=1}^N \Delta t \langle \mathbf{c}_{i,k}^*, \boldsymbol{\sigma}_k \rangle + \varepsilon_i, \quad (4.2.19)$$

qui le rend explicite. Remarquons qu'à ce stade on revient à la formulation prenant en compte les erreurs ε .

En résumant, le but est de trouver $\boldsymbol{\sigma}$, le vecteur de valeurs de la source dans toutes les mailles, σ_k , qui satisfont l'équation de mesure en formulation duale :

$$\mu_i = \sum_{k=1}^N c_{i,k}^* \sigma_k + \varepsilon_i. \quad (4.2.20)$$

Il s'agit d'une version discrète de l'équation (4.1.1). ε_i désigne l'erreur d'observation mais incorpore également l'erreur modèle, les deux liées à la mesure i . Dans le but de simplifier les formules et les interprétations, le volume de la maille spatiale et également le pas de temps Δt ont été incorporés dans la définition de σ_k . Pour cela σ_k sera exprimé dans les unités du débit d'une source de traceur. Notons aussi que, contrairement à l'équation précédente nous revenons au cas d'un seul radionucléide et les vecteurs $\mathbf{c}_{i,k}^*$ et $\boldsymbol{\sigma}_k$ multi-isotopiques sont réduits à une seule composante $c_{i,k}$, σ_k .

4.2.3 Calcul des solutions adjointes à l'aide de la différentiation automatique

Il y a deux manières d'obtenir la solution adjointe $c_{i,k}^*$:

- La première consiste à prendre l'adjoint du problème continu et ensuite le discrétiser. Il s'agit en effet du modèle direct donné par l'équation (2.1.1) pour lequel on a effectué l'inversion du temps, du vent et on a transposé la matrice cinétique. Les autres processus sont inchangés. Cette approche fait une approximation de l'ordre de l'erreur de représentativité qui découle de la discrétisation.
- Dans la deuxième approche on prend l'adjoint du problème déjà discrétisé. Dans ce cas, $c_{i,k}^*$ est vraiment la solution de l'adjoint du modèle discret, équation (4.2.17).

Les deux approches ne commutent pas, nous avons sciemment choisi la deuxième. En effet, les résultats des simulations de la dispersion atmosphérique proviennent de l'exécution d'un modèle direct. En conséquence, l'exigence de compatibilité impose le choix d'adjoint du modèle utilisé qui est discret. Néanmoins coder l'adjoint du problème discret peut s'avérer beaucoup plus coûteux que le codage du modèle direct. En effet, ceci nécessite un suivi du code existant et en particulier de reporter toutes les modifications ayant lieu dans le code direct sur l'adjoint. Par conséquent l'approche avec l'adjointisation du modèle discret est devenu réaliste seulement avec l'utilisation des différenciateurs automatiques. Ces travaux ont été effectués avec *Odyssée*, un outil de l'INRIA (Institut national de recherche en informatique et en automatique), [Faure et Papegay, 1998].

Odyssée exige que le programme original soit écrit en Fortran77 et de plus qu'il suive un certain nombre de règles. Le développement des scripts permet de s'en servir efficacement. L'intérêt d'un tel investissement est la capacité d'obtenir l'adjoint immédiatement après l'achèvement du code direct. L'équation (4.2.18) permet d'effectuer un test de la qualité des solutions adjointes - le test de dualité. Il consiste à comparer une mesure d'activité volumique générée par le modèle direct avec le produit scalaire de la source et de la solution adjointe correspondante à la mesure.

Le test a été fait pour toutes les solutions adjointes qui sont utilisées dans la suite de ces travaux. L'erreur commise est inférieure à 0.01% ce qui montre un accord quasiment parfait, au niveau de l'erreur numérique des rétropanaches sauvegardés en simple précision. Cet accord à deux raisons. La première est la linéarisation du schéma d'advection pour lequel nous avons débranché le limiteur de flux et aboutit à un schéma upwind d'ordre un. La deuxième est liée à l'utilisation d'un différenciateur automatique qui fournit l'adjoint du modèle numérique utilisé pour produire les mesures μ_i en mode direct.

4.3 Reconstructions. Expériences de sensibilité

4.3.1 Expériences synthétiques (OSSE)

Configuration

(i) Sites nucléaires en Europe.

Le cadre de cette étude est constitué d'un ensemble de 330 installations nucléaires en Europe et presque 4000 stations de mesures.

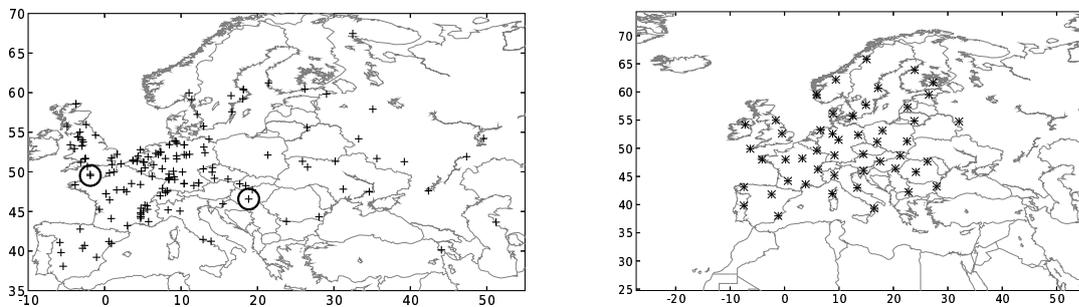


FIG. 4.3.1 – La figure de gauche représente toutes les installations nucléaires en Europe. Les sites d'accidents hypothétiques, Flamanville et Paks, ont été entourés. La figure de droite montre les 50 stations de mesure sélectionnées pour nos expériences

Parmi les installations se trouvent principalement des réacteurs qui fonctionnent et fournissent de l'énergie électrique mais aussi des réacteurs de recherche ainsi que des réacteurs déclassés. Les usines d'enrichissement d'uranium, de production du combustible nucléaire et de post-traitement du combustible usé font aussi partie de cette liste. Elle est complétée par des lieux de stockage des déchets radioactifs. Le nombre de sites a été réduit à $N_s = 134$ parce que l'on a identifié les installations qui se trouvent dans la même maille spatiale.

Les stations de mesure sont celles qui constituent le réseau de surveillance de la radioactivité dans l'environnement, REM (Radioactivity Environmental Monitoring).

À l'origine elles couvrent le continent avec une densité variable, la moitié des stations étant présentes en Allemagne. Parmi toutes ces stations, 50 ont été choisies de manière à couvrir le continent à peu près uniformément (voir figure 4.3.1).

(ii) Le choix des sources et périodes d'observations. Simulations des rejets.

L'étude présentée dans ce chapitre porte sur la dispersion de ^{131}I . Il y a plusieurs raisons derrière le choix de cet élément. D'abord, son abondance parmi les produits de fission implique que dans le cas d'un rejet accidentel l'émission de ^{131}I est très probable. Deuxièmement, ses propriétés volatiles permettent de le transporter sur des très longues distances. En conséquence, on s'attend à des conséquences mesurables sur de grandes surfaces. Finalement, la demi-vie de ^{131}I , 8 jours, étant du même ordre de grandeur que la période de simulation, la décroissance radioactive devient un processus important d'appauvrissement.

Nous avons simulé deux types d'accidents hypothétiques correspondant à deux localisations de la source, à savoir Flamanville en France et Paks en Hongrie. Il y a deux raisons derrière le choix de la centrale à Flamanville. La première est sa position en Normandie qui implique une grande probabilité de contamination de l'Europe due aux des vents majoritairement de l'ouest. La deuxième raison est la construction planifiée d'un réacteur de troisième génération à Flamanville, ce qui implique une activité nucléaire sur ce site pendant les décennies à venir. La motivation derrière le choix de la deuxième source, celle à Paks, a été la volonté de simuler un nuage provenant d'une centrale de type soviétique. On a également voulu simuler la contamination d'une région, et par conséquent des stations de mesure, différentes de celles affectées par la première source. En même temps le but était de confiner la contamination en Europe et en conséquence on a évité de placer la source trop loin à l'est. Notons qu'un des scénarios des exercices internationaux d'urgence nucléaire (INEX-2-Hun) a pris comme source d'un rejet hypothétique la centrale de Paks et le résultats de la simulation avec le modèle DERMA sont présentés dans [Baklanov, 1999].

La configuration du domaine utilisé dans les expériences synthétiques peut être retrouvée dans l'annexe A.3.4. Nous avons choisi deux périodes de simulation : 2–9 mai et 2–9 octobre 2001. Tout rejet commence à 09h00 le deuxième jour de simulation (3 mai ou 3 octobre respectivement) et dure 12 heures. Pour être sûr de pouvoir collecter des observations mesurables nous avons décidé de relâcher l'activité qui correspond approximativement à la moitié de l'activité rejetée pendant le premier jour de l'accident à Tchernobyl. Nous avons donc émis $2.30 \times 10^{17} \approx \frac{1}{2} \cdot 4.5 \times 10^{17}$ Bq, [NEA, 2003]. Les processus d'appauvrissement pris en compte sont ceux qui ont été décrits dans la section 2.3. La période d'observation coïncide avec les 7 jours de simulation. Les mesures sont moyennées sur 3 h et prises avec une fréquence de 3 h. Parmi toutes les mesures qui ont été collectées, 896 ont été choisies au hasard pour être employées dans des inversions. Ces mesures peuvent être parfaites ou bruitées. Dans ce deuxième cas le bruit est formé par une fraction de la valeur d'une mesure.

Pour illustrer les simulations, nous montrons sur les figures 4.3.2 et 4.3.3 le développement de deux panaches suite à un rejet à Flamanville et sur les figures 4.3.4 et 4.3.5 deux exemples d'un nuage émis par la centrale de Paks.

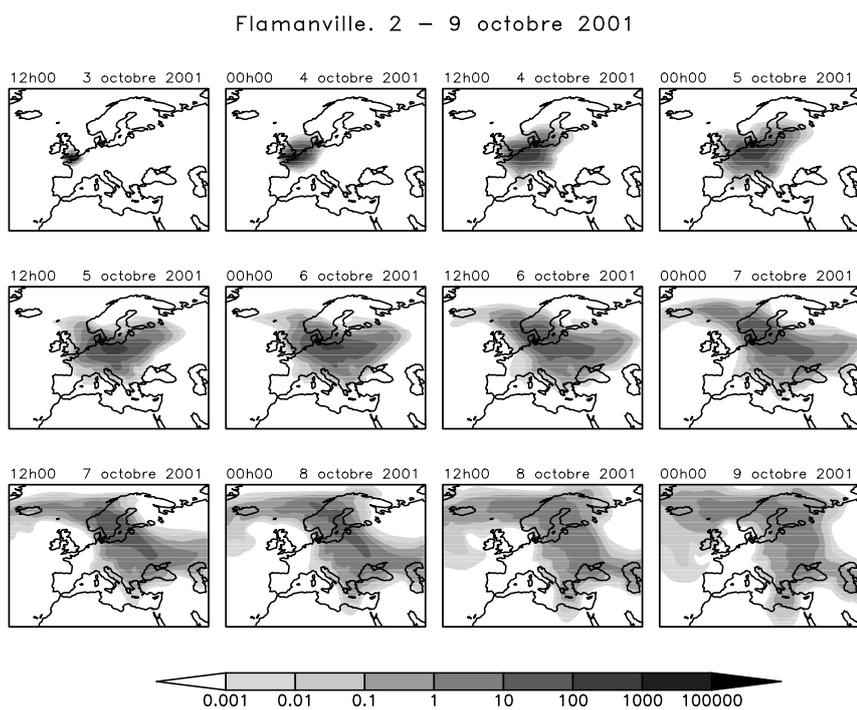


FIG. 4.3.2 – Le panache du rejet à Flamanville (0900 - 2100 UTC le 3 octobre 2001). Les activités volumiques sont exprimées en Bq.m^{-3}

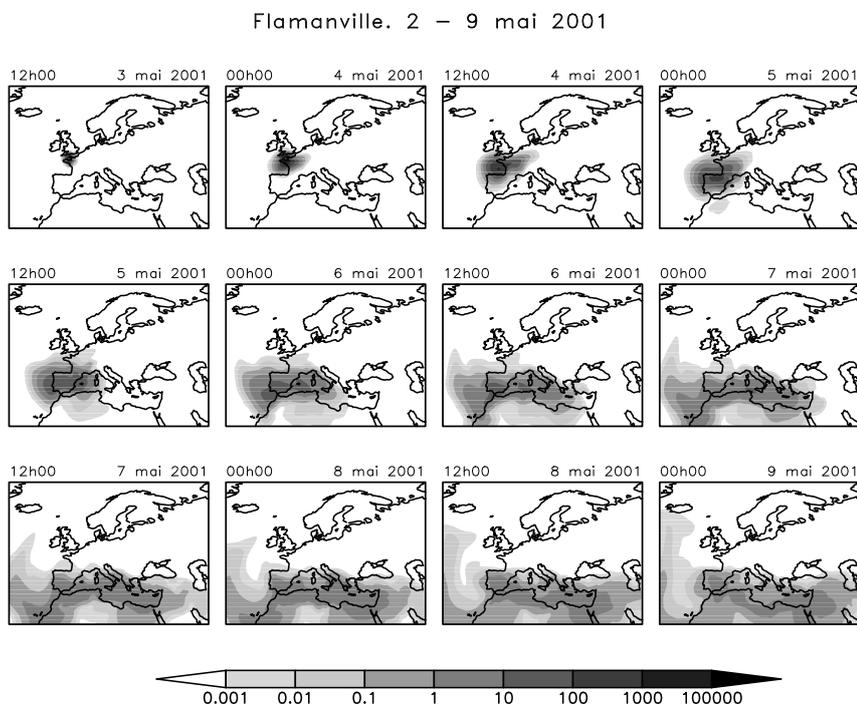


FIG. 4.3.3 – Le panache du rejet à Flamanville (0900 - 2100 UTC le 3 mai 2001). Les activités volumiques sont exprimées en Bq.m^{-3}

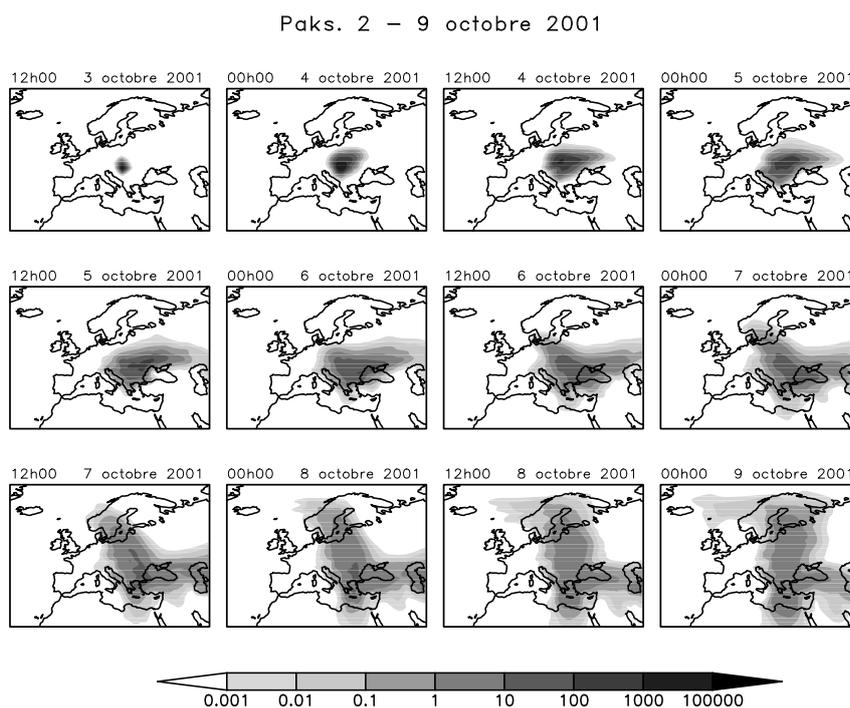


FIG. 4.3.4 – Le panache du rejet à Paks (0900 - 2100 UTC le 3 octobre 2001). Les activités volumiques sont exprimées en Bq.m^{-3}

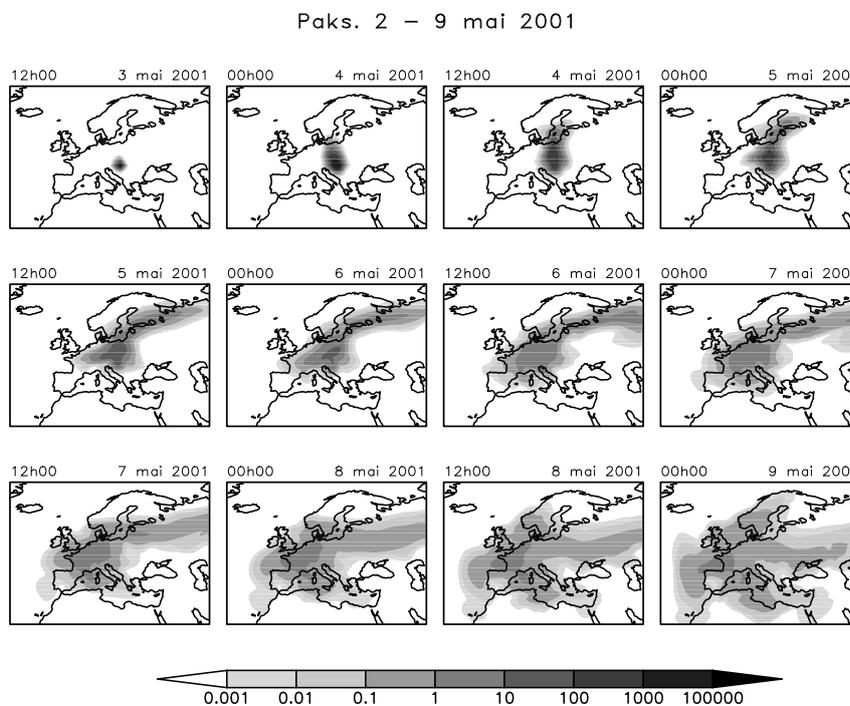


FIG. 4.3.5 – Le panache du rejet à Paks (0900 - 2100 UTC le 3 mai 2001). Les activités volumiques sont exprimées en Bq.m^{-3}

Sensibilité des reconstructions

On reconstruit seulement des mailles spatiales contenant des sites nucléaires, 134 au total. La reconstruction se fait avec la fréquence d'une heure sur l'intervalle de la reconstruction réduit de 168 à 150 heures.

L'examen des sensibilités de reconstruction est double. Au premier niveau on se focalise sur la dépendance de la qualité de reconstruction en fonction du nombre de mesures utilisées. Pour cela on divise l'ensemble de toutes les 896 mesures en 16 sous-ensembles. Chaque sous-ensemble contient le précédent et 56 mesures supplémentaires. Parmi les 56 mesures supplémentaires il y en a une pour chaque sous-intervalle (3 h) de l'intervalle original. Au deuxième niveau l'étude se focalise sur des facteurs qui influent sur la forme de cette dépendance. Parmi ces facteurs il y a la position de la source, les conditions météorologiques ou des connaissances a priori. Le reste de cette section est consacré à étudier et comparer les différentes inversions.

(i) Connaissances a priori.

Dans un premier temps nous inversons la source du même rejet accidentel, notamment l'émission ayant lieu entre 0900 et 2100 UTC le 3 octobre 2001 à Flamanville. La comparaison se réfère à la performance de deux informations a priori qui décrivent une source délocalisée et localisée. Dans le cas d'une source a priori délocalisée ou d'indépendance totale des mailles, la contribution de la connaissance a priori sur la source permet d'écrire la fonction coût donnée par (4.1.18),

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{k=1}^N \ln [1 - \gamma + \gamma \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}])] - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}$$

où nous avons choisi $\gamma = \gamma_k$ pour tout k .

Sur la figure 4.3.6 nous avons illustré l'activité reconstruite (selon l'équation (4.1.23)) à Flamanville, l'activité totale reconstruite dans le domaine suspecté et le score. Le score étant l'indicateur de la performance de l'inversion (voir section 4.1.6), nous allons focaliser notre analyse sur cet indicateur. Sur les figures 4.3.6(c) et (e) on remarque que le score varie entre 0 et 1 ou autrement dit entre une reconstruction ayant échoué et une reconstruction parfaite. Regardant la figure 4.3.6(c) obtenue pour la source délocalisée nous remarquons la croissance du score avec l'augmentation du nombre de mesures. Au début la croissance est plutôt lente et cette partie de la courbe correspond à une reconstruction qui a échoué. Nous en montrons un exemple sur la figure 4.3.6(a). Ensuite, dès que le nombre de mesures dépasse 300, la courbe marque une région de transition. Elle correspond à des reconstructions partielles dont un exemple est donnée sur la figure 4.3.6(d). Le nombre de mesures continue à augmenter mais la courbe s'aplatit. Au delà de 600 mesures les valeurs du score oscillent à proximité de 1, ce qui indique une reconstruction parfaite (figure 4.3.6(b)).

Nous allons maintenant comparer les résultats dont nous venons de discuter à ceux fournis par une source a priori localisée, encodée par la fonction de partition (4.1.19) qui conduit à la minimisation de l'entropie relative de la forme 4.1.20,

$$\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \ln \left[\sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma + \gamma \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)] \right] - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}$$

où, de nouveau, nous avons supposé $\gamma = \gamma_k$ pour tout k . Remarquons qu'il s'agit d'un cas dans lequel l'entropie de la vraie source n'est pas accessible analytiquement

(section 4.1.7) et elle doit être obtenue numériquement pour pouvoir accéder aux valeurs du score.

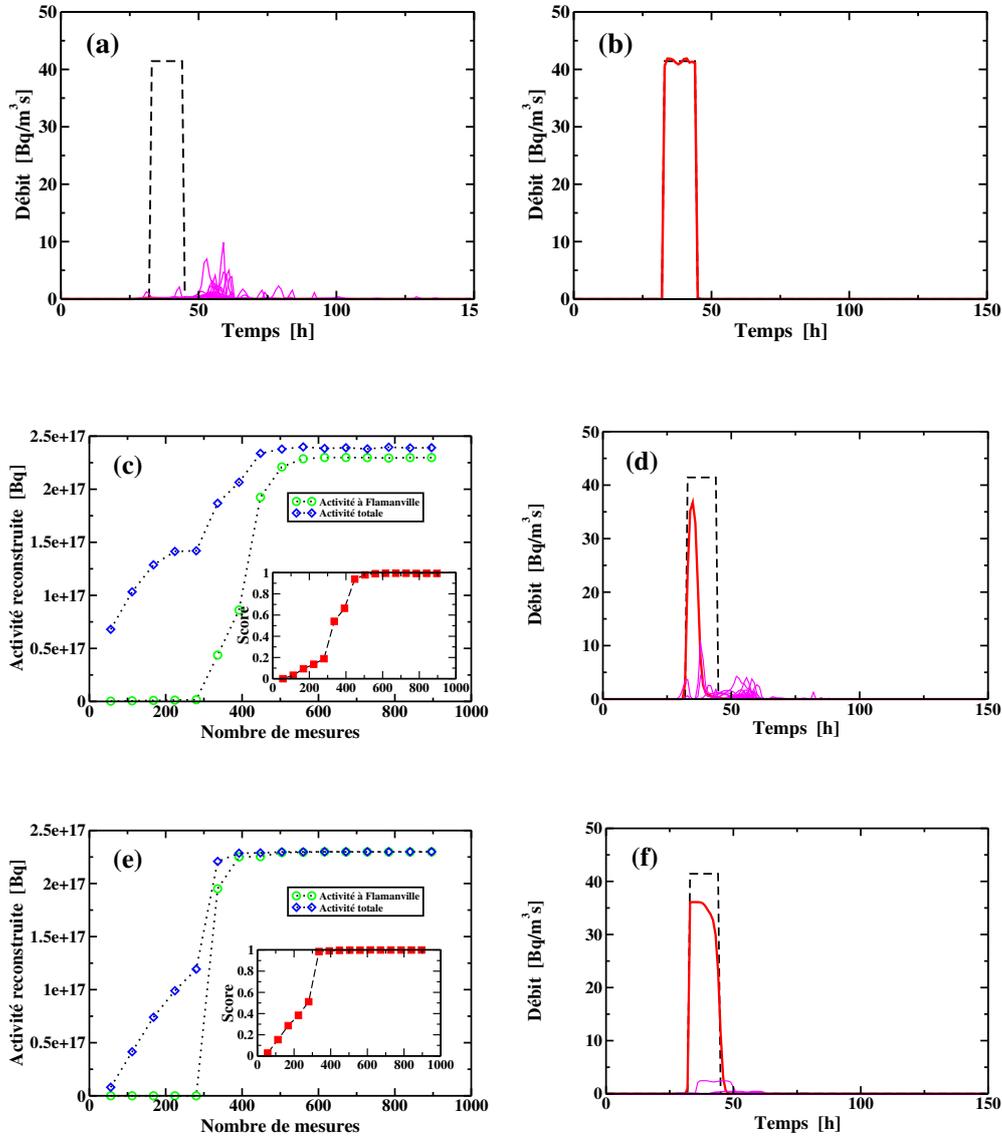


FIG. 4.3.6 – (c) et (f) montrent l'activité reconstruite à Flamanville (cercles), l'activité totale reconstruite (losanges) et le score (carrés) pour un rejet à Flamanville (0900 - 2100 UTC le 3 octobre 2001). (c) représente les résultats obtenus pour une source a priori délocalisée, fonctionnelle (4.1.18), (e) a été obtenue en minimisant la fonctionnelle décrivant la source a priori localisée, (4.1.20). (a), (b), (d) sont des exemples de reconstruction obtenues avec (4.1.18) et (f) est un exemple résultant du deuxième type d'information a priori (4.1.20). La vraie source a une forme rectangulaire et est désignée par une ligne en pointillé. Les lignes pleines et il y en a 134 (une pour chacune maille contenant un site nucléaire) correspondent aux sources reconstruites, la plus épaisse correspondant à Flamanville. (a) est un exemple d'une reconstruction qui a échoué (280 mesures) et (b) d'une reconstruction presque parfaite (672 mesures). 336 mesures ont été utilisées pour les deux reconstructions partielles (d) et (f) et illustrent la différence de la performance de deux fonctionnelles employées

Le score qui décrit l'inversion dans ce deuxième cas, figure 4.3.6(e), croît plus rapidement que dans le cas précédent. La transition est plus abrupte que celle de la

figure 4.3.6(c) et intervient pour un nombre moins élevé de mesures. Mais la qualité de la reconstruction effectuée à l'aide de la fonctionnelle (4.1.20) est d'avantage visible dans les profils reconstruits. En effet, des profils reconstruits à la base du même nombre de mesures identiques sont montrés sur les figures 4.3.6(d) et (f). Nous remarquons que tandis que la source a priori délocalisée ne permet dans ce cas qu'une reconstruction partielle, la source a priori localisée permet de retrouver la forme rectangulaire de la vraie source dont seulement un bout de la partie supérieure n'est pas reconstruit.

Nous venons de constater que l'algorithme employant la fonctionnelle (4.1.20) reposant sur une source a priori localisée produit de meilleurs résultats que l'approche reposant sur la source a priori délocalisée et par conséquent la fonction coût donnée par (4.1.18). Remarquons que la vraie source est localisée. Le résultat obtenu est donc une confirmation de la meilleure performance de l'information a priori qui est en conformité avec la vraie source.

À partir de maintenant toutes les inversions utilisant des mesures synthétiques, sont effectuées en s'appuyant sur l'information a priori qui stipule une source localisée.

(ii) Changer la localisation d'une source.

La deuxième comparaison a pour but d'examiner l'influence de la localisation de la source sur la qualité de l'inversion. La première source est celle inversée dans le paragraphe (i), localisée à Flamanville et émettant entre 0900 et 2100 UTC le 3 octobre 2001. La deuxième source diffère de la première exclusivement par sa localisation spatiale et se trouve à Paks. Nous venons d'analyser l'inversion de la première source, voir figures 4.3.6(a) - (d). Les résultats pour la seconde sont montrés sur la figure 4.3.7.

L'analyse du comportement de score en fonction du nombre de mesures, permet de se rendre compte immédiatement que l'inversion de la deuxième source fonctionne bien. Déjà pour le deuxième ensemble de mesures, 112, le score s'approche de 1 et la reconstruction est presque parfaite. Un exemple d'une telle reconstruction est montré dans la figure 4.3.7(b). Le profil présenté a été obtenu sur la base de 336 mesures et est directement comparable avec de moins bonnes reconstructions illustrées sur les figures 4.3.6(d) et (f).

On remarque donc que des inversions effectuées en des circonstances identiques et en s'appuyant sur la même méthode, conduisent à des performances qui diffèrent significativement. La raison peut être la localisation centrale de Paks qui, contrairement à Flamanville, se trouve au centre du domaine couvert par le réseau d'observation. De plus, Paks est mieux isolé d'autres centrales et donc d'autres mailles suspectées que Flamanville.

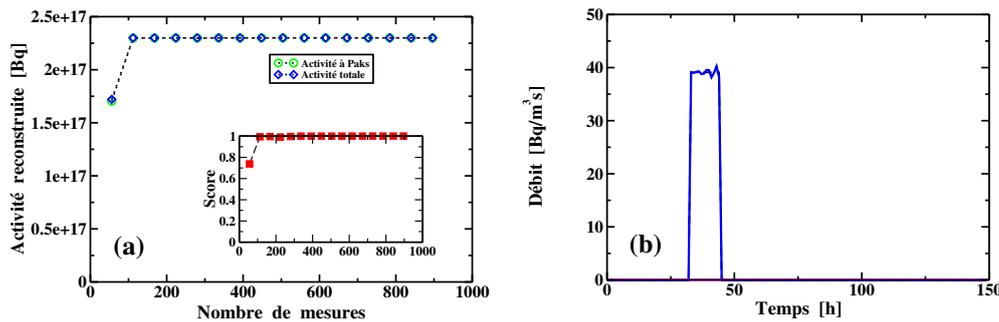


FIG. 4.3.7 – La figure de gauche (a) montre l'activité reconstruite à Paks (cercles), l'activité totale reconstruite (losanges) et score (carrés). La figure de droite (b) est un exemple d'un profil reconstruit avec 336 mesures. La vraie source est marquée avec une ligne en pointillé (pas visible), les 134 sources reconstruites avec des lignes pleines (pas de contributions visibles non plus) et la source à Paks avec une ligne épaisse

(iii) Augmenter des erreurs des mesures synthétiques.

Nos investigations se focalisent maintenant sur l'influence des erreurs de mesure sur la qualité de la reconstruction. On perturbe les mesures, équation (4.2.13), pour l'accident de Paks décrit auparavant, paragraphe (ii), avec un bruit gaussien :

$$\mu_i = \sum_{k=1}^N \Delta_t \pi_{i,k} c_{i,k} + \epsilon_i, \quad (4.3.1)$$

$\epsilon_i \sim N(0, \frac{m}{100} \cdot \mu_i)$. Il s'agit donc de modifier une sortie de modèle par l'addition d'une variable aléatoire de la distribution gaussienne centrée sur zéro et dont l'écart-type vaut $m\%$ de la mesure. Nos analyses reposent sur des bruits qui valent 5%, 10%, 20% et finalement 30% de la valeur de mesure. La fonction coût minimisée dans cette configuration prend la forme, d'après (4.1.20) :

$$\Psi(\beta) = \ln \left[\sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] \right] + \frac{1}{2} \beta^T \mathbf{R} \beta - \beta^T \boldsymbol{\mu}, \quad (4.3.2)$$

où on remarque l'apparition du terme $\frac{1}{2} \beta^T \mathbf{R} \beta$ lié à l'erreur a priori.

Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 4.3.8. Ils sont à comparer à l'inversion du même accident mais effectuée sur des mesures parfaites (voir figure 4.3.7). La forme de la courbe du score ne change pas et le score croît avec le nombre de mesures. Mais la présence du bruit l'empêche d'atteindre 1, d'autant plus que le bruit est important (voir les valeurs du score sur les figures 4.3.8(a) - (d)). De même, pour un nombre de mesures donné, les valeurs du score diminuent avec la croissance de l'erreur. Les reconstructions ne sont donc jamais parfaites et, comme le score, elles se détériorent avec la croissance de l'erreur de mesure. Cela se remarque facilement sur les profils illustrés dans la partie basse de la figure 4.3.8. Néanmoins, au-dessous de 20% l'influence de l'erreur de mesure est limitée. Même si la forme précise de la source ne peut pas être atteinte par l'algorithme de reconstruction, la source reconstruite couvre l'intervalle temporel occupé par la vraie source. Nous reconstruisons une grande partie de l'activité rejetée et de plus nous n'observons pas de contributions significatives provenant d'autres sources.

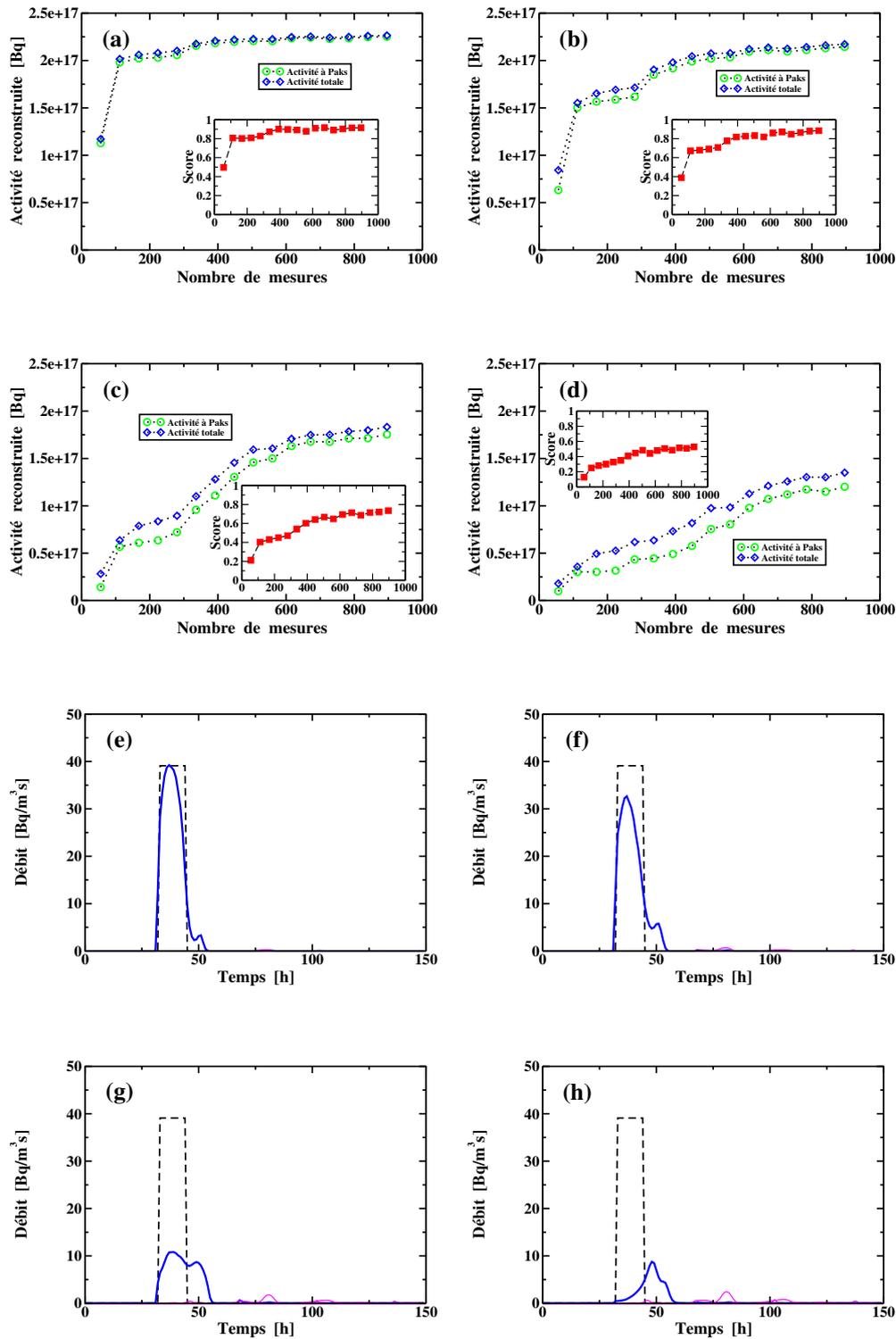


FIG. 4.3.8 – Les quatre premières figures illustrent la dépendance de l'activité reconstruite à Paks (cercles), l'activité totale reconstruite (losanges) et le score (carrés) du nombre de mesures. Figure (a) montre des résultats obtenus avec une erreur de 5%, (b) avec 10%. Les deux suivantes, (c) et (d) correspondent à l'erreur de mesure égale à 20% et 30% respectivement. Les figures qui suivent montrent des exemples de reconstructions de source. Toute reconstruction illustrée a été obtenue avec 336 mesures. La vraie source est désignée avec la ligne en pointillé et des sources reconstruites avec des lignes pleines. La source à Paks est représentée par la plus épaisse d'entre elles. Les figures (e), (f), (g) et (h) correspondent aux erreurs de mesure de 5% (a), 10% (b), 20% (c) et finalement 30% (d)

(iv) Variation des conditions météorologiques

Nous considérons de nouveau la source placée à Flamanville et examinons l'influence des conditions météorologiques sur la qualité de la reconstruction. Pour cela nous inversons deux accidents, le premier ayant lieu entre 0900 et 2100 UTC le 3 octobre 2001, le deuxième entre 0900 et 2100 UTC le 3 mai 2001. Remarquons que dans le premier cas, figure 4.3.2, il s'agit d'une circulation déterminée par la présence d'un anticyclone au-dessus de la Grande-Bretagne. Tandis qu'au printemps, figure 4.3.3, l'absence de vents dominants implique un panache moins tordu, déterminé principalement par la diffusion. Les résultats d'inversion pour le premier accident ont été montrés sur la figure 4.3.6(e). Les résultats d'inversion du deuxième sur la base de mesures parfaites sont montrés sur la figure 4.3.9(a). La comparaison avec l'accident correspondant qui a lieu en automne permet de remarquer rapidement que le nouvel accident s'inverse beaucoup plus difficilement que le précédent. Le score croît lentement avec des mesures. Il en faut beaucoup pour atteindre le régime de la reconstruction et la transition entre la reconstruction ayant échoué et parfaite est ici immédiate (pour 448 la reconstruction échoue, pour 504, qui est l'ensemble suivant, elle est presque parfaite).

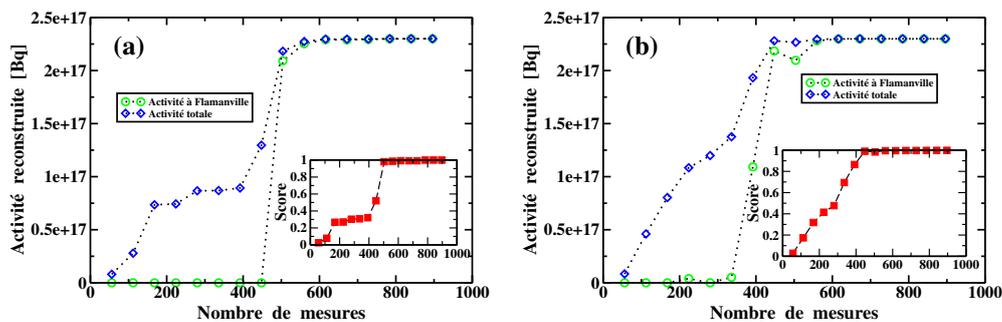


FIG. 4.3.9 – La figure de gauche (a) montre l'activité reconstruite à Flamanville (cercles), l'activité totale reconstruite (losanges) et le score (carrés). Le rejet accidentel reconstruit a eu lieu entre 0900 et 2100 UTC le 3 mai 2001. La figure de droite (b) montre des caractéristiques de la reconstruction pour une source à 2 pas émettant entre 0900 et 2100 UTC le 3 octobre 2001

(v) Un autre profil de la source.

Puis, nous testons la capacité de la méthode à reconstruire un profil qui décrit un débit variable en temps (source en deux temps). Les résultats des inversions sur les mesures parfaites sont montrés sur la figure 4.3.9(b). Comme dans le cas précédent, la distinction entre la reconstruction ayant échoué et la reconstruction parfaite n'est pratiquement pas visible. C'est parce que dans ce cas la courbe de score monte rapidement à partir de la première inversion. Pour un nombre suffisamment grand de mesures parfaites la courbe de score sature autour de 1 ce qui correspond à une reconstruction parfaite.

4.3.2 Reconstruction rapide : un outil de réponse en cas de crise

Réduction du groupe de candidats

Dans le cas de résultats douteux, nous avons fait un essai d'amélioration de la performance de la méthode d'inversion. Nous avons réduit progressivement le nombre

de sites inversés. Dans la première étape, tous les 134 sites ont participé à l'inversion en s'appuyant sur toutes les 896 mesures. Nous avons calculé l'activité reconstruite sur chacun de ces sites. Le choix de 64 sites correspondant aux plus grandes activités reconstruites a été fait. Ces 64 sites forment l'ensemble des mailles inversées dans la deuxième expérience. À la sortie de cette inversion 32 sites ayant la plus grande activité reconstruite sont retenus pour l'expérience suivante et ainsi de suite. L'algorithme permet de réduire le nombre de sites à 1 en passant par 16, 8, 4 et 2, toutes des puissances de 2.

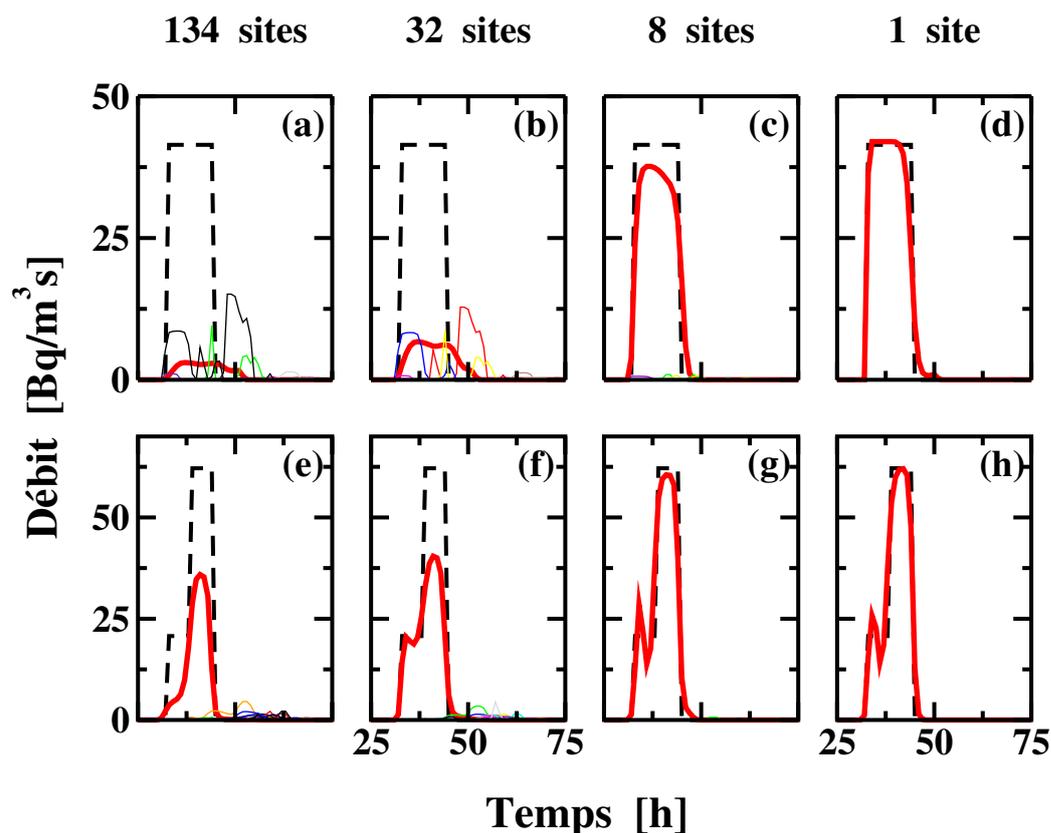


FIG. 4.3.10 – Les figures montrent des profils reconstruits. La vraie source est désignée avec une ligne en tirets et des sources reconstruites en lignes pleines. Parmi eux la ligne la plus épaisse désigne la source à Flamanville. Les figures dans le premier rang, (a), (b), (c) et (d) se réfèrent à la source émise en mai à Flamanville. Ils ont été obtenus pour 134, 32, 8 et 1 sites inversés respectivement, toutes en utilisant des mesures bruitées par 5% de leur valeur. Dans le deuxième rang nous présentons l'inversion de la source en deux pas. Ici de nouveau (e), (f), (g) et (h) correspondent aux inversions de 134, 32, 8 et 1 sites respectivement sur des mesures perturbées de 5% de leur valeur

Nous montrons l'utilisation de la technique de réduction des sites suspectés pour deux rejets accidentels. Dans les deux cas la source est localisée à Flamanville. Le premier accident est celui inversé dans le paragraphe (iv), le second est celui présenté dans le paragraphe (v). Mais ici nous nous appuyons sur des mesures bruitées avec le bruit égal à 5% d'une mesure parfaite.

Dans la première étape, l'inversion est effectuée sur toutes les mailles contenant les sites nucléaires. Des sources reconstruites dans ces deux cas se trouvent sur les figures 4.3.10(a) et (e). La reconstruction de la source de mai, (a), n'est pratiquement

pas visible. Elle donne de meilleurs résultats dans le cas de la source en deux temps, (e), mais ne résout pas la forme exacte de la vraie source. Les résultats d'inversion s'améliorent avec la décroissance du nombre de sites suspectés. Nous remarquons sur la figure 4.3.10(c), l'inversion de 8 sites, que le profil reconstruit remplit l'espace occupé par la vraie source. De même, figure 4.3.10(f), montre que l'inversion sur 32 mailles reflète déjà la présence du deuxième pas de la vraie source. Les deux sont ensuite clairement visibles sur la figure 4.3.10(g) où 8 mailles ont été utilisées par l'algorithme d'inversion.

Du point de vue de la théorie d'information l'opération de réduction écarte des états peu probables. Ceci apporte de l'information supplémentaire au système d'inversion et c'est avec l'information supplémentaire qu'on fait l'inversion suivante. Par conséquent le contenu final d'information est plus élevé que la somme des observations et, comme nous venons de l'illustrer, ce fait peut conduire à des reconstructions améliorées.

4.4 Des essais d'inversion sur l'accident d'Algésiras

Dans cette partie de la thèse nous présentons une application de la méthode du maximum d'entropie à l'inversion d'une source d'un vrai rejet de radioactivité dans l'atmosphère. Il s'agit de l'incident d'Algésiras dont les causes ont été déjà décrites dans le chapitre (1) et dont la simulation en mode direct a été présentée dans le chapitre (2).

Les estimations post-accidentelles ont permis de localiser l'endroit du rejet sans aucun doute puisque des radionucléides ont été retrouvés sur des filtres d'un des fours de fonderie à Algésiras. Nous rappelons ici ces estimations, [Baklanov, 1999], qui placent l'instant du rejet dans l'intervalle 0100 - 0300 UTC le 30 mai 1998 et évaluent la quantité émise à un ordre de grandeur près : $8 - 80$ Ci ou $2.96 \times 10^{11} - 2.96 \times 10^{12}$ Bq de manière équivalente. Nous nous posons comme objectif de retrouver ces caractéristiques à la base des mesures collectées.

L'ensemble des mesures et des solutions adjointes associées

Pour inverser la source accidentelle il faut d'abord construire l'opérateur \mathbf{H} qui permet de faire le lien entre les mesures connues et la source recherchée. Les mesures collectées ont déjà été décrites dans la section 2.3.5. Chacune des mesures définit une fonction d'échantillonnage qui constitue un forçage $\pi_{i,n}$ de l'équation adjointe (4.2.17). L'ensemble de 118 solutions adjointes (une par mesure) décrit l'opérateur \mathbf{H} selon la formule (4.2.1). Les mesures utilisées dans cet exercice étant les activités volumiques moyennes, la fonction d'échantillonnage est simplement l'inverse de la période sur laquelle la mesure a été prise. Elle est donc égale à $1/\Delta t$ pour tout pas de temps qui contribue à la moyenne. De plus les poids $\frac{1}{2}$ sont associés au premier et dernier intervalle à cause du lissage de la procédure de la prise de mesure encodée dans POLAIR3D. Par conséquent, pour une maille spatiale donnée l_0 nous avons, si on moyenne sur l'intervalle $[n_{\text{beg}}, n_{\text{end}}]$:

$$\pi_{i,n} = \frac{1}{(n_{\text{end}} - n_{\text{beg}})} \begin{cases} \frac{1}{2\Delta t} & \text{pour } k = (l_0 - 1) \cdot N_t + n_{\text{beg}}, \\ \frac{1}{\Delta t} & \text{pour } k = (l_0 - 1) \cdot N_t + n, \text{ où } n \in [n_{\text{beg}} + 1, n_{\text{end}} - 1], \\ \frac{1}{2\Delta t} & \text{pour } k = (l_0 - 1) \cdot N_t + n_{\text{end}}. \end{cases} \quad (4.4.1)$$

Préconditionnement

Les stations de mesure qui ont enregistré des activités élevées suite à l'accident à Algésiras ne sont pas distribuées uniformément dans le domaine, voir figure 2.3.18. La majorité est éloignée spatialement avec a peu près un tiers des mesures qui ont été rassemblées sur la Côte d'Azur, à Piémont et dans la partie ouest de la Lombardie. Les rétropanaches associés se recouvrent fortement d'autant plus que les mesures et par conséquent les forçages de l'équation adjointe s'étalent sur plusieurs jours. Il en résulte un mauvais conditionnement de la matrice \mathbf{H} . Le mauvais conditionnement se répercute sur les difficultés à minimiser la fonctionnelle Ψ . D'abord, la convergence des algorithmes itératifs est lente. En plus, dans le régime de transition entre une reconstruction ayant échoué et parfaite (ce régime est visible sur les figures illustrant le score, par exemple figure 4.3.6(c), et correspond à la pente forte de la courbe) la minimisation ne converge pas.

Pour contourner ce problème nous avons proposé de pré-conditionner le problème de minimisation de Ψ en s'appuyant sur la solution du problème analogue construit sur la base de la distribution gaussienne : $\Psi(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}^T (\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R}) \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\mu}$, l'équation (4.1.30). Posons :

$$\boldsymbol{\Omega} = (\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^T + \mathbf{R})^{-\frac{1}{2}}, \quad (4.4.2)$$

un opérateur symétrique ($\boldsymbol{\Omega}^T = \boldsymbol{\Omega}$) grâce à la symétrie des matrices de covariance d'erreur : \mathbf{R} et \mathbf{B} . Remarquons qu'il peut être calculé en amont de l'inversion puisque tous les éléments sont connus. En effet \mathbf{H} a été déjà construit sur la base des solutions adjointes donc implicitement des mesures. Ce sont également les mesures qui définissent la matrice d'erreur \mathbf{R} . L'information a priori sur la source définit \mathbf{B} et nous la prenons de la forme $[\mathbf{B}]_{kl} = m^2 \delta_{k,l}$.

En effectuant le changement des variables $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\omega}$ et, pour demeurer cohérent, en définissant :

$$\mathbf{H}' = \boldsymbol{\Omega}\mathbf{H}, \quad \boldsymbol{\mu}' = \boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\mu} \quad \text{et} \quad \mathbf{R}' = \boldsymbol{\Omega}\mathbf{R}\boldsymbol{\Omega}^T, \quad (4.4.3)$$

la fonction coût $\Psi(\boldsymbol{\beta})$ devient $\Psi(\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\omega}) = \varphi(\boldsymbol{\omega})$ qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \varphi(\boldsymbol{\omega}) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\Omega}^T \boldsymbol{\Omega}^{-1} \boldsymbol{\Omega}^{-1} \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\Omega}^T \boldsymbol{\mu} \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}^T \boldsymbol{\mu}' . \end{aligned} \quad (4.4.4)$$

Le nouveau problème est correctement conditionné et nous espérons que le conditionnement est suffisant pour les trois fonctionnelles utilisées dans cette thèse et reposant sur la loi a priori de Bernoulli. En effet, nous avons constaté que cette transformation permet de résoudre le problème de conditionnement. Les minimisations de φ sont beaucoup plus rapides que les minimisations de Ψ . Même dans le régime de transition elles convergent et aboutissent à un minimum de la fonction coût.

Reconstruction du profil temporel

Tout au début remarquons, qu'à cause de la surhauteur du rejet, voir section 2.3.5, figure 2.3.19, nous cherchons à inverser la source non pas au sol mais au deuxième niveau, placé entre 64 et 236 m.

Premièrement, nous supposons que la source est localisée dans une maille spatiale contenant Algésiras pour une résolution spatiale du domaine $0.5^\circ \times 0.5^\circ$. Dans ce cas

nous reconstruisons uniquement le profil temporel de la source. L'intervalle de temps d'inversion coïncide avec celui de la simulation directe et s'étend entre 0000 UTC le 21 mai le 1800 UTC et le 18 juin 1998, soit 690 heures. Le rejet ayant lieu entre 0100 et 0300 UTC le 30 mai correspond aux valeurs 217 – 219 sur l'axe du temps.

Un modèle eulérien privé d'une initialisation d'une source ponctuelle ne simulera pas correctement des concentrations à son voisinage. Parmi les 118 mesures il y en a deux qui ont été prises à Gibraltar, très près d'Algésiras. Puisque ces deux mesures ne peuvent pas être assimilées sans l'augmentation dramatique de l'erreur modèle, elles ont été éliminées de cette étude.

Nous allons comparer des profils reconstruits à l'aide de deux différents a priori. Pour rendre la comparaison possible nous gardons la valeur du paramètre m constante et ajustons les valeurs de γ pour s'assurer que la masse a priori dans le domaine est identique pour les deux fonctionnelles. Il s'agit de comparer la performance de la fonctionnelle délocalisée reposant sur (4.1.18) et donnée par la formule :

$$\Psi(\beta) = \sum_{k=1}^N \ln [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] + \frac{1}{2} \beta^T \mathbf{R} \beta - \beta^T \boldsymbol{\mu}, \quad (4.4.5)$$

et la fonctionnelle localisée et instantanée qui découle de (4.1.22) et qui s'écrit :

$$\Psi(\beta) = \ln \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] \right] + \frac{1}{2} \beta^T \mathbf{R} \beta - \beta^T \boldsymbol{\mu}. \quad (4.4.6)$$

Dans les deux cas il s'agit d'ajouter à la forme déjà introduite le terme $\frac{1}{2} \beta^T \mathbf{R} \beta$. Remarquons que pour un domaine d'inversion restreint à une maille spatiale les fonctionnelles délocalisée et localisée coïncident. Par conséquent seulement une de deux est utilisée dans cette étude. Sur la figure 4.4.1(a) nous montrons le profil temporel de la source reconstruit à l'aide d'une fonctionnelle reflétant une source délocalisée. Les valeurs élevées du débit s'étalent sur l'intervalle [207, 214] avec le maximum atteint pour 211 h, six heures avant le début du rejet estimé par les autorités nucléaires espagnoles. À côté nous montrons sur la figure 4.4.1(b) le résultat obtenu pour la source a priori localisée et instantanée donc à l'aide de la fonctionnelle prescrite par l'équation (4.4.6). Les valeurs du débit qui sont distinctivement différentes de zéro correspondent à l'intervalle [209, 214] et la valeur maximale est atteinte à 212 heures.

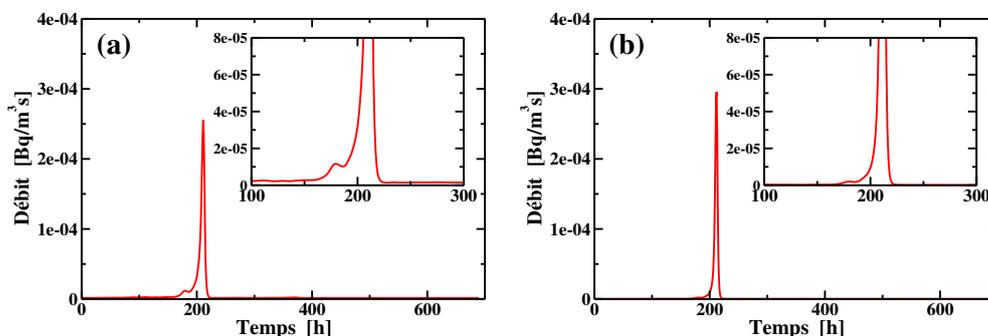


FIG. 4.4.1 – Les figures montrent le débit de la source de l'incident d'Algésiras reconstruit sous l'hypothèse d'une localisation connue. (a) correspond à l'information a priori qui sous-entend une source délocalisée, fonction coût (4.4.5). (b) a été obtenue pour la source a priori localisée et instantanée en employant la fonction coût (4.4.6)

Nous remarquons en regardant ces deux figures que (b) montre un profil plus étroit. Cette forme a été obtenue grâce à l'emploi d'une fonctionnelle incarnant l'information en plus grande conformité avec la vraie source que l'approche reposant sur la source a priori délocalisée. L'activité reconstruite vaut 3.83×10^{12} Bq pour la fonctionnelle localisée et 2.82×10^{12} Bq pour la fonctionnelle décrivant une source a priori localisée et instantanée. Si nous avons inclus les deux mesures prises à Gibraltar dans l'ensemble des mesures utilisées dans l'inversion, la masse reconstruite serait 0.27×10^{12} Bq dans les deux cas. Ce fait est en conformité avec une forte sur-estimation d'une de deux mesures à Gibraltar pour une simulation directe utilisant la vraie source.

Reconstructions 3D

Nous avons effectué un grand nombre d'essais d'inversion simultanée de la position et du débit de la source accidentelle à Algésiras. Nous avons testé des changements de la résolution spatiale ($0.5^\circ \times 0.5^\circ$, $1.0^\circ \times 1.0^\circ$, $2.0^\circ \times 2.0^\circ$ et $4.0^\circ \times 4.0^\circ$) et temporelle (entre 1 et 24 h). Nous avons également joué sur les valeurs des paramètres décrivant la distribution a priori, surtout les erreurs $\zeta(\varepsilon)$ mais également de la source $\nu(\sigma)$. Tous ces essais ont échoué. Nous allons donc présenter une tentative d'explication de cet échec.

Pour cela nous nous sommes posés la question de la capacité qu'ont ces mesures de reconstruire la source dans un cas idéal. Il s'agit donc de la question du contenu informatif des mesures dont nous disposons. Nous nous sommes appuyés sur 116 mesures (toujours sans les deux mesures prises à Gibraltar), cette fois synthétiques. Les mesures synthétiques ont une distribution spatiale et temporelle identique aux vraies mesures. Elles ont été générées selon l'équation (4.2.19) en utilisant les rétropanaches calculés pour des vraies mesures et une source fictive coïncidant avec la vraie source. Plus précisément, il s'agit d'une source émettant 1.85×10^{12} Bq entre 0100 et 0200 UTC le 30 mai 1998. Sur la base des mesures synthétiques ainsi construites, nous avons effectué un ensemble de tests.

Toutes ces expériences d'inversion sur des mesures synthétiques n'ont de sens que si nous sommes capables de comparer les résultats qu'elles fournissent. Pour cela nous nous appuyons sur le score, défini par la formule (4.1.37). Il requiert la connaissance de l'entropie relative de la vraie source. Pour y accéder nous nous appuyons sur la fonction coût décrivant le problème primal au premier niveau (voir section 4.1.7). La forme de cette fonctionnelle a été calculée dans l'annexe C.4 et nous rappelons ici le résultat pour une source a priori localisée et instantanée. Notons σ_t la seule composante non-nulle de la vraie source et (m, γ) les paramètres de la loi de Bernoulli décrivant les états a priori au sein d'une seule maille. Dans l'espace des états l'entropie relative ($-\Psi_t$) de la vraie source s'écrit :

$$\begin{aligned} (-\Psi_t)^{\text{localisée-instantanée}} &= \frac{\sigma_t}{m} \ln N + \frac{\sigma_t}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma_t}{m} \ln \frac{\sigma_t}{m} \\ &+ \left(1 - \frac{\sigma_t}{m}\right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_t}{m}\right) - \ln(1-\gamma). \end{aligned} \quad (4.4.7)$$

Nous considérons la valeur du score 0.5 ou plus comme un indicateur d'une reconstruction de la qualité suffisante. Comme l'indiquent les tests sur des mesures synthétiques une telle valeur du score peut être atteinte si l'écart-type paramétrisant la loi gaussienne d'erreur, équation (4.1.29), n'est pas plus grande que $10 \mu\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$. En effet, en analysant les valeurs du score pour cette valeur d'erreur, voir tableau 4.4.1, nous

nous apercevons que pour une telle qualité de mesures, une reconstruction serait possible pour le maillage grossier (la résolution $4.0^\circ \times 4.0^\circ$ et $2.0^\circ \times 2.0^\circ$). Mais la valeur de $10 \mu\text{Bq.m}^{-3}$ ne reflète pas correctement les erreurs de mesures dont nous disposons. Nous croyons que la valeur d'écart-type de $1000 \mu\text{Bq.m}^{-3}$ serait plus appropriée pour refléter, avant tout, l'erreur modèle. C'est cette valeur qui a été utilisée pour obtenir les reconstructions 1D sur les vraies données. Dans ce cas malheureusement le contenu en information de ces 116 mesures synthétiques n'est pas suffisant et la reconstruction de la source n'est pas possible, même avec le maillage grossier, voir tableau 4.4.2.

A priori	Localisée-instantanée		
Résolution	Ψ	Ψ_t	ρ
$4.0^\circ \times 4.0^\circ$	-3.4045	-5.3589	0.6353
$2.0^\circ \times 2.0^\circ$	-3.7541	-6.0908	0.6164
$1.0^\circ \times 1.0^\circ$	-0.4598	-6.7795	0.0678

TAB. 4.4.1 – Score ρ pour des expériences jumelles calculé avec l'entropie reconstruite Ψ et la vraie entropie Ψ_t . Nous présentons les résultats pour la source a priori localisée et instantanée pour diverses résolutions spatiales. La variance d'erreur vaut $10 \mu\text{Bq.m}^{-3}$

A priori	Localisée-instantanée		
Résolution	Ψ	Ψ_t	ρ
$4.0^\circ \times 4.0^\circ$	-1.6296	-5.3589	0.3041
$2.0^\circ \times 2.0^\circ$	-1.1029	-6.0908	0.1811
$1.0^\circ \times 1.0^\circ$	-0.3185	-6.7795	0.0470

TAB. 4.4.2 – Score ρ pour des expériences jumelles calculé avec l'entropie reconstruite Ψ et la vraie entropie Ψ_t . Les résultats concernent la source a priori localisée et instantanée et diverses résolutions spatiales. La variance d'erreur vaut $1000 \mu\text{Bq.m}^{-3}$

Les tests sur les mesures synthétiques que nous venons de décrire ont été faits sur 116 mesures. Supposons maintenant que le deux mesures initialement rejetées, ont été ajoutées à l'ensemble. Dans ces circonstances l'inversion de la source s'améliore de façon spectaculaire. Dans le cas synthétique, même pour l'écart-type de l'ordre de $1000 \mu\text{Bq.m}^{-3}$, la localisation de la source devient possible. Ceci s'explique par le fait que le contenu d'information de ces deux mesures est très élevé. Mais la masse et le temps du rejet ne sont pas reproduits correctement.

Remarquons pour terminer que le travail avec des mesures localisées au voisinage d'une source n'est pas toujours malhonnête. Dans des circonstances accidentelles la localisation de la source n'est pas nécessairement connue et donc il n'est pas possible d'ordonner les mesures en fonction de leur distance par rapport à la source. En revanche l'utilisation de ces mesures pourrait donner une fausse image de la capacité véritable de reconstruction dans un cas réel sur des mesures éparses. Néanmoins, si l'accident a lieu dans une centrale nucléaire, alors les mesures proches de la source provenant d'un réseau entourant l'installation seront disponibles. Et dans ce cas le nombre de mesures nécessaires pour réaliser l'inversion pourrait être plus petit.

4.5 Conclusions

Nous venons de présenter l'étude qui s'inscrit dans le cadre de la surveillance des rejets accidentels de radioactivité dans l'atmosphère à l'échelle continentale. Nous avons proposé des solutions au problème de reconstruction des sources qui sont à l'origine de ces rejets accidentels. Une reconstruction de la source utilisant des mesures d'activité volumique s'inscrit dans un cadre de la classe des problèmes inverses. Ce problème, à cause d'un nombre limité de mesures et la grande taille du vecteur source, est mal posé. Sa solution requiert qu'il soit régularisé. Nous le régularisons en s'appuyant sur la méthode de maximum d'entropie sur la moyenne. C'est une approche qui consiste à minimiser l'information fournie au procédé d'inversion. Elle a des avantages qui lui permettent d'opérer sur des descriptions faites avec d'autres lois de probabilité que la loi gaussienne. En occurrence, pour des sources accidentelles des radionucléides qui sont positives et bornées, la loi de Bernoulli est une meilleure description que la loi gaussienne. D'autres informations a priori que la méthode gère sont le confinement spatial ou spatio-temporel de la source.

Dans cette étude nous utilisons d'autres informations a priori, cette fois-ci pas liées à la méthode employée. Premièrement, nous considérons que le rejet de radioactivité a eu pour origine une des centrales ou d'autres installations à caractère nucléaire en Europe. Ceci limite le nombre des mailles suspectées à celles qui sont occupées par ces installations. Dans le but de l'application opérationnelle, nous proposons de restreindre le nombre des sites suspectés davantage en utilisant le critère de l'activité reconstruite.

La minimisation des fonctions coût construites par la méthode de maximum d'entropie se fait dans l'espace physique (d'observations). Elle est donc nécessairement plus rapide qu'une minimisation d'une fonctionnelle définie dans l'espace des états qui est d'une grande dimension. De même, l'opérateur \mathbf{H} faisant lien entre la source et les mesures est calculé en utilisant le mode adjoint. Ce calcul s'effectue ligne par ligne et le nombre d'exécutions du modèle est égale un nombre de lignes dans \mathbf{H} donc des mesures prises en compte dans le processus d'inversion.

Une série des tests a été effectuée dans le but de présenter les capacités de la méthode de reconstruire une source. Dans un premier temps il s'agissait des mesures synthétiques. Pour reconstruire la position et le profil d'une source, il nous suffit de nous appuyer sur un nombre de mesures d'un à deux ordres de grandeur inférieur par rapport au nombre d'inconnues. Nous avons également montré la performance des nouvelles fonctions coût désignées dans le cadre de cette thèse. Elles ont été construites dans le but d'incarner l'information a priori qui serait en conformité avec une source accidentelle. Nous avons montré qu'elles performant mieux qu'une fonction coût plus générale, notamment la fonctionnelle délocalisée. Ensuite, nous avons tourné notre attention vers les mesures synthétiques bruitées. La qualité d'inversion a forcément baissé, d'autant plus que l'importance d'erreur était plus grande. Mais, au moins sur les exemples présentés, nous réussissons toujours à reconstruire le profil occupant l'intervalle du vrai rejet. En plus, parmi les sources reconstruites, celle positionnée au lieu de l'accident est le seul candidat possible pour la vraie source. Les contributions d'autres sources reconstruites sont négligeables.

Les difficultés auxquelles nous devons faire face en bruitant les mesures constituent seulement un avant-goût des difficultés rencontrées dans le cas d'inversion d'une vraie source. Pour l'accident d'Algésiras qui avait lieu non pas dans une centrale nucléaire mais dans un fourneau d'acier nous ne pouvons pas utiliser l'information qui nous

permettait jusqu'à maintenant de restreindre le nombre des mailles suspectées. Dans un premier temps nous l'avons donc mise dans l'algorithme d'inversion en supposant la localisation de la source parfaitement connue. Cette restriction nous a permis de reconstruire la masse et le profil temporel qui s'accordent bien avec les estimations post-accidentelles. La reconstruction 3D c'est-à-dire la reconstruction simultanée de la localisation et du profil temporel s'est avérée impossible. Nous avons constaté que l'erreur modèle devrait être mise au niveau de $10\mu\text{Bq.m}^{-3}$ si on voudrait inverser la source avec les 116 mesures disponibles. Pourtant l'erreur modèle actuelle se situe plutôt au niveau $1000\mu\text{Bq.m}^{-3}$. La réduction d'erreur modèle demanderait le raffinement des champs météorologiques (le champ du vent et de la diffusion turbulente). L'influence des champs météorologiques opérationnels et ERA-40 de ECMWF que nous avons pu constater par ailleurs en mode direct en est bon témoin.

Le contenu de ce chapitre a donné lieu à deux manuscrits, "Source reconstruction of an accidental radionuclide release at European scale", [Krysta et Bocquet, 2006], soumis à The Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society et "Source reconstruction for Accidental Releases of Radionuclides", [Krysta et al., 2005b], accepté dans les actes de colloque d'un NATO Advanced Research Workshop.

Chapitre 5

Conclusions

5.1 Synthèse des travaux présentés

Nous avons commencé ce travail par une série d'expériences sur la modélisation de la dispersion de radionucléides. En constatant qu'elles reproduisent correctement l'ordre de grandeur des mesures, nous avons cherché à améliorer davantage leur performance en nous appuyant sur l'assimilation de données.

Nous avons abordé l'assimilation de données avec deux modèles à deux échelles différentes. C'est l'échelle du problème qui, en conjonction avec la richesse des modèles utilisés, a défini le cadre principal du travail. Mais ce cadre a été également contraint par les mesures dont nous avons disposé. Trois classes de mesures ont été assimilées par les modèles dans ces travaux, notamment des mesures synthétiques, parfaites et bruitées, des mesures de haute qualité collectées dans une soufflerie et des mesures de qualité inconnue résultant d'un vrai accident. L'incorporation des mesures au sein de la modélisation a eu pour but de modifier les paramètres de forçage du modèle pour que les prévisions s'accordent mieux aux mesures. En parallèle, nous avons exploré la possibilité d'inversion de sources effectuées sur la base de ces mesures et pas exclusivement pour améliorer la prévision, ce qui est garanti par la construction de l'algorithme variationnel de l'assimilation de données. Nous avons eu comme objectif de reconstruire la vraie source. La reconstruction est d'autant meilleure que le modèle sur lequel elle s'appuie est meilleur.

Pour le modèle à bouffées, PX0.1, appliqué à décrire l'expérience dans une soufflerie, l'influence de l'erreur modèle est limitée. Dans la version 0.1 elle est liée principalement aux défauts de modélisation du transport autour d'obstacles. Pour combler ces manquements nous avons utilisé l'approche variationnelle standard. Nous avons construit un vecteur d'état constitué de paramètres de forçage du modèle. Le gradient de la fonction coût exigé par des algorithmes de minimisation a été calculé dans un mode adjoint. La qualité du modèle nous a permis d'aborder l'inversion du débit de la source dans un premier temps. Ensuite, nous avons étendu le problème à l'optimisation d'autres paramètres de forçage. Ayant testé auparavant la sensibilité des résultats à un ensemble des paramètres, nous avons cherché ceux qui sont responsables de la distribution spatiale du panache. Les paramètres ayant une influence significative sont bien évidemment les composantes de la vitesse du vent. Elles ont été optimisées dans un premier temps avec le débit de la source. Puis, l'ensemble des variables optimisées a été agrandi pour y incorporer les paramètres de la turbulence. Puisque la raison ultime du développement de ce système est l'utilisation à des fins opérationnelles, nous avons également abordé

le problème de la réduction du réseau de mesures.

À l'échelle continentale, la taille du problème à résoudre peut constituer un obstacle à la reconstruction d'une source. En effet, pour un problème discret, une source est un vecteur de nombreuses composantes inconnues. Si le nombre de mesures est restreint, alors le problème inverse, qui consiste à reconstruire la position et du profil temporel d'une source, est mal posé. Pour le résoudre nous avons fait appel à des techniques avancées de l'assimilation de données, notamment la méthode du maximum d'entropie. Cette technique de régularisation nous a permis d'appliquer la loi de Bernoulli pour décrire la source a priori et d'exploiter ainsi le fait qu'un rejet accidentel est borné en espace et en temps. Nous nous en sommes servis ici de manière élégante en employant pour la première fois la méthode du maximum d'entropie dans le cadre de la dispersion de radionucléides. En exploitant d'autres informations sur une source accidentelle nous avons proposé de nouvelles fonctions coût. Elles sont particulièrement adaptées au problème d'inversion de sources accidentelles. Pour tester la performance de la méthode indépendamment d'un modèle de dispersion, nous avons abordé le problème de la reconstruction sur des mesures synthétiques. Des expériences jumelles utilisant l'inventaire des installations nucléaires européennes et des stations du réseau de la surveillance radiologique ont été effectuées. Nous avons présenté une série de tests de faisabilité de la méthode sur des mesures parfaites et bruitées. Les performances des nouvelles fonctionnelles ont été comparées entre elles et les tests de sensibilité des résultats ont été effectués. Dans un deuxième temps nous avons appliqué les fonctionnelles proposées dans cette thèse pour inverser une source de l'incident radiologique survenu dans une fonderie à Algésiras au sud de l'Espagne en 1998. Nous avons effectué une inversion 1D, donc du profil temporel du débit sous l'hypothèse d'une localisation connue.

5.2 Conclusions

Bien que PX0.1 soit adapté à incorporer la variabilité des conditions météorologiques et du débit de la source, dans cette étude nous avons été limités par la configuration expérimentale qui les a imposées constants. Puisque la réponse que nous apportons est adaptée au problème, nous avons restreint le cadre de l'assimilation de données dans ce cas. En effet, il s'est avéré suffisant de réduire l'ensemble de variables optimisées à quelques éléments seulement.

Premièrement, nous avons constaté qu'un nombre très limité des mesures bien choisies au cœur du panache permet d'inverser correctement le débit de la source. La qualité d'inversion dépend de la qualité du modèle et nous remarquons qu'elle est meilleure dans la configuration dans laquelle le modèle performe mieux. Cette constatation est évidente, et dans le cadre de l'inversion de sources de radionucléides a été soulignée dans [Robertson et Langner, 1997] et [Drews, 2005]. Dans ces travaux le lien entre l'inversion sous-estimant la source et la sur-estimation des mesures générées en mode direct par la vraie source est clairement évoqué.

Dans un deuxième temps nous avons montré à quel point l'assimilation de mesures peut améliorer la qualité des résultats. Nous avons montré que l'optimisation d'autres paramètres que le débit de la source améliore l'accord entre les sorties du modèle et les mesures. Nous avons pu décaler les profils modélisés vers ceux qui ont été mesurés, grâce à l'optimisation des composantes horizontales de la vitesse du vent. Nous avons remarqué que dans le cas d'un modèle de moindre qualité l'optimisation de paramètres a amélioré l'inversion du débit et inversement. Mais nous ne disposons pas d'information

pour en tirer des conclusions plus générales. Nous nous sommes également rendu compte qu'il est difficile de discerner entre l'influence de la source et celle de la vitesse du vent horizontale.

Nous avons effectué des tests sur des petits réseaux ainsi que sur des grands ensembles de mesures. Bien que, dans le deuxième cas, la valeur de la fonction coût évaluée globalement sur toutes les mesures est plus petite que dans le cas de l'utilisation d'un petit nombre de mesures, le débit reconstruit s'accorde moins bien avec la vraie valeur. Par ailleurs, en effectuant une réduction d'un réseau de mesures nous avons pu identifier des stations qui améliorent, qui n'influencent pas ou qui dégradent l'inversion du débit. Nous en concluons que pour qu'une inversion donne de bons résultats dans un cas réel, il faut non seulement une quantité suffisante de mesures mais également de sélectionner celles qui sont consistantes entre elles. En effet, les mesures qui contiennent des informations contradictoires fournissent de l'information récupérée par le bruit et par conséquent détériorent l'inversion. On voit donc que c'est non seulement la quantité mais aussi la qualité de mesures qui est importante dans le procédé de l'assimilation de données.

En parallèle de l'augmentation du nombre de mesures, nous avons également pu nous pencher sur la question de l'influence du nombre de paramètres optimisés. Le champ à explorer dans ce deuxième cas est restreint pour un modèle à bouffées. Nous avons néanmoins pu constater que l'introduction de composantes de la vitesse du vent a permis d'améliorer l'accord des profils mesurés et modélisés. Nous avons remarqué que l'accord s'améliore davantage si des paramètres de la turbulence sont ajoutés à l'ensemble des paramètres optimisés.

Nous déduisons donc de l'ensemble de ces tests qu'il vaut mieux, dans cette application, inverser plus de paramètres que de faire appel à un grand nombre de mesures et optimiser un nombre restreint des paramètres. En effet, le nombre croissant des paramètres à ajuster permet plus de souplesse dans le rapprochement des profils calculés aux profils optimisés et, par conséquent, une plus importante réduction de l'erreur modèle.

Le problème d'inversion de sources à l'échelle continentale a été posé dans un cadre différent. Ce cadre est plus complexe que celui de la petite échelle parce qu'il s'agit d'inverser la position et le débit variable d'une source. Mais ce cadre s'est avéré aussi plus souple en offrant la possibilité de choisir le positionnement de la source et des mesures, des conditions météorologiques et surtout de travailler, en premier temps, dans un monde parfait. Si ce cadre a été choisi, c'est parce que le monde idéal nous a offert accès aux mesures synthétiques et nous a permis de tester les capacités de la méthode du maximum d'entropie pour inverser de sources de radionucléides.

L'information a priori concernant la positivité de la source et son confinement spatio-temporel constitue une régularisation du problème inverse. Les fonctions coût reflétant ce confinement ont été construites et leur meilleure performance par rapport aux fonctions coût incarnant moins d'information a priori a été illustrée. Nous concluons que l'information a priori consistante avec la vraie source est un élément très important du procédé de reconstruction et permet améliorer les résultats. En particulier le bénéfice de l'utilisation de l'information a priori plus contraignante consiste en des résultats qui sont de meilleure qualité pour des mesures identiques.

Nous avons observé que pour les mesures synthétiques parfaites la reconstruction parfaite est possible pour un nombre de mesures significativement plus petit que le nombre de variables inversées. Nous avons remarqué qu'ajouter des mesures parfaites

à l'algorithme d'inversion améliore le score et donc la qualité de l'inversion. La raison derrière ce phénomène étant la compatibilité des mesures et du modèle. Ceci est aussi majoritairement le cas pour de mesures synthétiques bruitées, comme démontre l'analyse de courbes du score qui croissent avec le nombre de mesures sans être parfaitement monotones. Nous avons cherché à détecter des cadres de la bonne et de la mauvaise reconstruction en effectuant de tests de sensibilité. Nous avons remarqué que la performance de la méthode varie selon les facteurs externes, comme la situation météorologique, la forme de la source ou sa position. Cette dépendance est liée au contenu informatif des mesures utilisées dont génération est influencée par les facteurs analysés. En ce qui concerne la sensibilité de résultats par rapport à la position de la source, son isolement d'autres sources suspectées rend la reconstruction plus facile. Si ceci n'est pas le cas, alors il peut parfois s'avérer difficile de retrouver les mesures qui permettent de discriminer entre les sources voisines. Si les mesures utilisées sont choisies au hasard, alors nombreuses doivent être assimilées par le système avant qu'il ne reçoive celles qui rapportent l'information significative.

Une méthode de reconstruction dans le cadre opérationnel consistant en une réduction progressive des sites suspectés a été également proposée et sa performance a été illustrée. Il s'agit de cas où les mesures ne fournissent pas d'information suffisamment riche pour permettre l'inversion. La réduction est une manière d'ajouter de l'information supplémentaire au sein du système. Nous avons observé comment cela élimine progressivement tous les sites suspectés, en permettant d'identifier la vraie source à la sortie de l'algorithme. Nous avons aussi pu constater, sans que les essais ne soient présentés dans la thèse, que l'inversion est robuste par rapport aux valeurs des paramètres de la loi de probabilité a priori. Ainsi la réduction de sites se comporte beaucoup mieux que le fait de varier les valeurs de la probabilité a priori selon qu'une maille est plus ou moins suspectée.

Finalement, ayant évalué la performance de la méthode, nous sommes passés aux expériences sur de vraies mesures. Ces mesures ont été associées au rejet accidentel d'Algésiras. Nous avons réussi à inverser le profil temporel de cette source sous l'hypothèse de la localisation connue. La quantité de la matière rejetée et le pic de débit s'accordent bien avec des estimations. Bien que cet accord n'est pas parfait, les paramètres de la vraie source sont également à prendre avec une certaine dose de prudence. En effet, le rejet n'était pas contrôlé et les estimations concernant le terme source ont été faites tard dans la phase post-accidentelle. La qualité des résultats d'inversion est vraiment bonne vu la restreinte distribution spatiale et la faible fréquence temporelle de mesures. Elle a pu être atteinte malgré l'importante erreur modèle grâce à d'autres qualités de la simulation directe. En effet, le biais étant relativement petit, la masse reconstruite s'accorde bien avec les estimations. En plus nous avons pu constater que le schéma d'advection en conjonction avec des champs de vent utilisés donne de bons résultats pour le temps d'arrivée du nuage. Grâce à cela, le profil temporel reconstruit est peu décalé, en comparaison avec la longueur de l'intervalle d'inversion, par rapport à ce qui est considéré comme le vrai temps de rejet. En plus, en comparant les résultats obtenus pour deux types d'information a priori, nous concluons que tant qu'on dispose des modèles dont la performance n'a pas suffisamment de qualité, contraindre l'inversion par l'information a priori cohérente avec la vraie source aide à la reconstruction.

Les conclusions globales de ces travaux sont sans doute plus difficiles à tirer. Il s'agit de comparer les résultats de deux méthodes variationnelles. Le choix de ces méthodes

étant lié à la taille du vecteur d'état qu'on cherche à inverser et non pas dans le but de comparer directement leur performance. La première approche repose sur la loi gaussienne et opère dans l'espace des états. L'autre en est une généralisation à d'autres lois de probabilité et fonctionne dans l'espace des observations de relativement petite taille. Les qualités de cette dernière approche pour inverser les sources de traceurs dans le cas d'un grand nombre d'inconnues sont incontestables.

5.3 Perspectives

Les travaux effectués en champ proche peuvent être extrapolés à un modèle plus avancé. En particulier il est facile d'étendre ces travaux pour inverser un débit non constant. D'autres variables peuvent être optimisées si la nécessité se présente. L'inversion d'une variable incorporant en même temps le débit et la vitesse du vent semble être le pas suivant à envisager. Il serait difficile d'échapper à la forme \dot{q}/u proposé dans [Drews, 2005] puisque c'est de cette manière qu'elle apparaît dans le modèle. Ensuite, d'autres paramètres peuvent se présenter comme des candidats, surtout le moment quand le modèle hybride sera disponible, [De Haan, 1999]. En effet, dans ce cas, il s'agit d'un modèle qui incorpore la turbulence de deux manières différentes. La turbulence de la petite échelle se traduit par la croissance de la taille d'une bouffée et la turbulence grande échelle par la forme sinueuse de sa trajectoire. La fréquence séparant les deux échelles de la turbulence pourrait être un paramètre important de l'assimilation de données.

Les modèles de transport grande échelle reposent sur des champs météorologiques de résolution limitée. Les connaissances des processus de dépôt sec et de lessivage ne seront jamais complètes. Ces modèles ne seront donc jamais totalement sûrs et par conséquent le fait de les coupler aux mesures améliorera les prévisions. Mais ces limitations ne signifient pas que la modélisation doit s'arrêter là. En effet, nous avons prouvé la faisabilité d'inverser la source sur la base d'un modèle parfait. Il en aurait suffi une centaine dans le cadre favorable, jusqu'à 500 dans un cadre défavorable. Il est vrai par ailleurs qu'en utilisant de mesures réelles, on n'atteindra jamais une reconstruction parfaite. Mais, si on veut s'appuyer sur un modèle pour inverser la vraie source, alors la modélisation directe, malgré ses limitations, a sans doute un grand effort à faire.

D'autre part on pourrait tenter d'aborder la modélisation de l'erreur modèle. L'emploi de techniques statistiques d'estimation de paramètres peut s'avérer utile pour bien pondérer des termes constituant la fonction coût et donc celui correspondant à l'erreur modèle par rapport à ces qui sont liés à l'ébauche et aux mesures. L'autre question qui mérite d'être posée concerne la possibilité de compenser l'erreur modèle par un nombre croissant de mesures.

En général, si un modélisateur peut avoir des souhaits envers de mesures, le premier est qu'il sache quoi, quand et de quelle manière les mesures ont été effectuées. Le problème est souvent également celui de la quantité et de la qualité de mesures. En effet, il est nécessaire de disposer d'un nombre suffisant de mesures, suffisant en comparaison de la taille du problème à inverser. Si on veut ce nombre élevé, c'est pour avoir plus de chances de rassembler de mesures à fort contenu informatif. Mais seulement celles qui sont compatibles avec le problème qu'on cherche à résoudre. Par conséquent, définir et explorer le contenu informatif d'une mesure serait sans doute bénéfique pour désigner un réseau de mesures aidant à la reconstruction.

Pour les données dont nous avons disposé pour ce travail (activités volumiques) le

traitement d'autres types de mesure n'était pas nécessaire. Mais l'inversion s'appuyant sur le maximum d'entropie ou réduite au cadre variationnel standard, permet d'incorporer les mesures en forme de dépôt au sol ou de débits de dose. Dans des cas simples la dose est proportionnelle à l'activité volumique et donc le traitement ne demande pas d'efforts supplémentaires. Pour calculer la dose sans approximations, par une intégrale de la distribution de l'activité volumique, le problème se pose à notre avis exclusivement en champ proche. Des travaux allant dans ce sens ont été déjà entrepris autour du projet RODOS et en particulier le débit de dose a constitué le vecteur d'état dans [Drews, 2005].

Annexe A

Simulations effectuées avec POLAIR3D

A.1 Schémas numériques

A.1.1 Schéma Direct Space Time pour l'advection

Le schéma implémentant l'advection pour la dispersion des polluants provenant d'un rejet accidentel devrait prendre en compte les inégalités de son distribution spatiale au voisinage du point d'émission. Ce fait est bien modélisé par une classe de schéma avec un limiteur de flux. Dans POLAIR3D il s'agit du schéma 'Direct Space Time' qui est de type volumes finis, [Spee, 1998], et qui a donc la propriété de conserver la masse. Il est monotone, positif et pondère la précision, discrétisation d'ordre 3 et la stabilité, discrétisation d'ordre 1.

Il s'écrit :

$$c_l^{n+1} = c_l^n + (F_{l-\frac{1}{2}} - F_{l+\frac{1}{2}}), \quad (\text{A.1.1})$$

où n parcourt le temps et l les mailles spatiales, avec $F_{l+\frac{1}{2}}$ donné par :

$$F_{l+\frac{1}{2}} = \nu_{l+\frac{1}{2}} \left(c_l + \psi \left(\nu_{l+\frac{1}{2}}, \theta_l \right) (c_{l+1} - c_l) \right) \quad \text{si } u_{l+\frac{1}{2}} \geq 0$$

ou :

$$F_{l+\frac{1}{2}} = -\nu_{l+\frac{1}{2}} \left(c_{l+1} + \psi \left(\nu_{l+\frac{1}{2}}, \frac{1}{\theta_{l+1}} \right) (c_l - c_{l+1}) \right) \quad \text{si } u_{l+\frac{1}{2}} < 0$$

Le limiteur de flux de Koren - Sweby, [Spee, 1998], ψ est défini par :

$$\psi(\nu, \theta) = \max(0, \min(1, d_0(\nu) + d_1(\nu)\theta, \mu\theta)) \quad (\text{A.1.2})$$

où

$$d_0(\nu) = \frac{1}{6}(2 - \nu)(1 - \nu), \quad d_1(\nu) = \frac{1}{6}(1 - \nu^2),$$

$$\nu_{l+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{\Delta x} |u_{l+\frac{1}{2}}|, \quad \theta_l = \frac{c_l - c_{l-1}}{c_{l+1} - c_l}.$$

μ dans l'équation (A.1.2) est pris comme dans [Verwer *et al.*, 1998b] :

$$\mu = \frac{1 - \nu}{\nu}.$$

Pour assurer la stabilité du schéma il faut respecter la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) :

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{u} \quad (\text{A.1.3})$$

qui fait intervenir les pas de la discrétisation spatiale et temporelle, Δx et Δt ainsi que la vitesse du vent u .

A.1.2 Solveur de Rosenbrock pour la diffusion

Pour l'intégration temporelle de la diffusion de radionucléides nous nous appuyons sur la méthode de Rosenbrock, [Verwer *et al.*, 1999]. Elle a été introduite à cause de sa capacité de résoudre les réactions chimiques habituellement traitées par POLAIR3D. Il s'agit du schéma d'ordre 2 de type Runge-Kutta semi-implicite. Il s'écrit :

$$c_{n+1} = c_n + \Delta t b_1 k_1 + \Delta t b_2 k_2, \quad (\text{A.1.4})$$

avec

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, c_n) + \Delta t \gamma A k_1 \\ k_2 = f(t_n + \alpha_{12} \Delta t, c_n + \alpha_{21} \Delta t k_1) + \Delta t \gamma_{21} A k_1 + \Delta t \gamma A k_2, \end{cases} \quad (\text{A.1.5})$$

où $A = \frac{\partial f}{\partial c}(t_n, c_n)$ pour une équation du type $\frac{\partial c}{\partial t} = f(t, c)$. La méthode est consistante pour tout A , si et seulement si :

$$b_1 = 1 - b_2; \quad \gamma_{21} = -\frac{\gamma}{b_2}; \quad \alpha_{21} = \frac{1}{2b_2}. \quad (\text{A.1.6})$$

Elle est A-stable si et seulement si $\gamma \geq \frac{1}{4}$ et L-stable pour $\gamma = 1 \pm \frac{\sqrt{2}}{2}$. Dans POLAIR3D nous remplaçons k_2 par $k_2 - 2k_1$ et nous utilisons $b_2 = \frac{1}{2}$ et $\gamma = 1 + \frac{\sqrt{2}}{2}$. Dans ce cas nous avons un schéma autonome suivant :

$$c_{n+1} = c_n + \frac{3}{2} \Delta t k_1 + \frac{1}{2} \Delta t k_2$$

avec

$$\begin{cases} (I - \gamma \Delta t A) \cdot k_1 = f(t_n, c_n) \\ (I - \gamma \Delta t A) \cdot k_2 = f(t_{n+1}, c_n + \Delta t k_1) - 2k_1. \end{cases}$$

A.2 Indicateurs statistiques

Pour décrire des indicateurs statistiques utilisés, nous introduisons les notations suivantes. Soit $\{\mu_i\}_{i=1}^d$ une suite de mesures et $\{\pi_i(c)\}_{i=1}^d$ une suite de prévisions de modèle qui lui correspond. Ici c est un champ d'activité volumique et π_i décrit la fonction d'échantillonnage correspondante à la i -ème mesure. Pour comparer les deux ensembles et saisir un lien entre eux, on peut s'appuyer sur un diagramme de corrélation (scatter plot) illustrant le nuage des points $(\mu_i, \pi_i(c))$. Si les points sont proches de la droite $\pi(c) = \mu$, alors ceci indique un bon accord entre le modèle et les mesures. Il s'agit néanmoins dans ce cas d'analyse qualitative, utile mais limitée, surtout si on veut comparer la performance de modèles entre eux. Pour cela, d'autres indicateurs statistiques, cette fois-ci quantitatifs, doivent accompagner le diagramme de corrélation. Nous rappelons leur définitions en nous appuyant sur [Mosca *et al.*, 1998] et [Brandt, 1998].

Biais

Le biais B est défini par la moyenne d'écart entre une valeur modélisée et une mesure correspondante :

$$B = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \mu_i). \quad (\text{A.2.1})$$

Il peut être positif ou négatif, en reflétant une sur- ou sous-estimation des mesures par un modèle.

Biais fractionnel

C'est un opérateur non linéaire qui représente une différence relative entre le modèle et les mesures selon :

$$\text{FB} = 2 \cdot \frac{\overline{\pi(c)} - \bar{\mu}}{\overline{\pi(c)} + \bar{\mu}}, \quad (\text{A.2.2})$$

où

$$\overline{\pi(c)} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \pi_i(c) \quad \text{et} \quad \bar{\mu} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \mu_i.$$

Le biais fractionnel est borné et varie dans l'intervalle $[-2, 2]$. Ses valeurs seaturent aux bords de cet intervalle et donc deux modèles caractérisés par, par exemple, des valeurs proches de 2 peuvent avoir des performances bien différentes.

Biais géométrique moyen

Dans le cas où le rapport entre une mesure et une prévision associée est important, le biais B peut être remplacé par sa forme logarithmique :

$$\begin{aligned} \text{MG} &= \exp \left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \ln \pi_i(c) - \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \ln \mu_i \right) = \exp \left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \ln \left[\frac{\pi_i(c)}{\mu_i} \right] \right) \\ &= \prod_{i=1}^d \left(\frac{\pi_i(c)}{\mu_i} \right)^{\frac{1}{d}}, \end{aligned} \quad (\text{A.2.3})$$

où une sous- et sur-estimation du même facteur reçoivent des mêmes poids. En effet, des contributions des $(\mu_i, \pi_i(c))$ ayant le même rapport $\frac{\pi_i(c)}{\mu_i}$ sont égales et deux contri-

butions pour lesquelles $\frac{\pi_i(c)}{\mu_i} = \frac{\mu_j}{\pi_j(c)}$ se compensent. Par conséquent, $MG = 1$ ne signifie pas nécessairement que toutes les mesures soient parfaitement modélisées.

L'erreur moyenne quadratique normalisée

Elle est définie par :

$$NMSE = \frac{1}{d} \cdot \frac{1}{\bar{\mu} \cdot \overline{\pi(c)}} \cdot \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \mu_i)^2. \quad (A.2.4)$$

Remarquons d'abord qu'il s'agit d'une valeur toujours positive. Elle n'exprime donc pas une sous- ou sur-estimation mais une déviation d'un modèle par rapport aux mesures. Des petites valeurs de NMSE indiquent qu'un modèle performe bien en temps et en espace. Mais des valeurs élevées ne signifient pas nécessairement un désaccord profond. En effet, un simple décalage spatial ou temporel peut conduire aux valeurs importantes de NMSE.

L'écart quadratique moyen

Une performance d'un modèle peut également être évaluée à l'aide de l'écart quadratique moyen :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \mu_i)^2}, \quad (A.2.5)$$

qui exprime la variabilité d'une suite de prévisions autour d'une suite de mesures.

Variance fractionnelle

$$FV = 2 \cdot \frac{\sigma_\mu^2 - \sigma_{\pi(c)}^2}{\sigma_\mu^2 + \sigma_{\pi(c)}^2}, \quad (A.2.6)$$

où

$$\sigma_\mu^2 = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\mu_i - \bar{\mu})^2 \quad \text{et} \quad \sigma_{\pi(c)}^2 = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \overline{\pi(c)})^2.$$

Elle est un équivalent du biais fractionnel mais s'appuie sur des variances et non pas sur des moyennes. Il faut noter que la variance fractionnelle est appelée consciemment écart-type fractionnel (fractional standard deviation, FSD) dans [Mosca *et al.*, 1998], ainsi que dans plusieurs publications autour de la validation d'ETEX.

Écart-type fractionnel

À son tour cet indice statistique repose sur des écarts-types des suites de mesures et de prévisions de modèle :

$$\sigma_\mu = \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\mu_i - \bar{\mu})^2} \quad \text{et} \quad \sigma_{\pi(c)} = \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \overline{\pi(c)})^2},$$

et est défini par :

$$FSD = 2 \cdot \frac{\sigma_\mu - \sigma_{\pi(c)}}{\sigma_\mu + \sigma_{\pi(c)}}. \quad (A.2.7)$$

Variance géométrique moyenne

Comme le biais géométrique, la variance géométrique est destinée aux cas où l'écart entre le modèle et les mesures est très important, plus important qu'un ordre de grandeur. De même, les contributions à l'exposant des couples $(\mu_i, \pi_i(c))$ qui sont caractérisés par le même rapport $\frac{\pi_i(c)}{\mu_i}$ sont identiques et celles pour lesquelles les ratios sont inversés, se compensent. La variance géométrique s'écrit :

$$\text{VG} = \exp \left[\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (\ln \pi_i(c) - \ln \mu_i)^2 \right]. \quad (\text{A.2.8})$$

Comme le biais géométrique, $\text{VG} = 1$ ne garantit pas une performance parfaite du modèle et ne signifie donc pas que les mesures et les prévisions coïncident.

Coefficient de corrélation

Le coefficient de corrélation entre deux variables aléatoires échantillonnées par $(\mu_i, \pi_i(c))$ est défini par :

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^d (\mu_i - \bar{\mu})(\pi_i(c) - \overline{\pi(c)})}{\sqrt{\sum_{i=1}^d (\mu_i - \bar{\mu})^2 \sum_{i=1}^d (\pi_i(c) - \overline{\pi(c)})^2}}. \quad (\text{A.2.9})$$

Il varie dans l'intervalle $[-1, 1]$ et représente un lien linéaire entre ces variables aléatoires, sa direction et sa puissance. Il est donc fréquemment utilisé pour fournir un indicateur quantitatif qui accompagne l'analyse qualitative faite avec le diagramme de corrélation.

Indice de mérite

La performance globale du modèle est caractérisée par l'indice de mérite. Elle peut se référer seulement à l'analyse spatiale, temporelle ou les deux à la fois. Pour un instant de temps donné, l'indice de mérite en espace exprime le pourcentage du chevauchement entre le panache mesuré, A_μ et modélisé, $A_{\pi(c)}$ selon :

$$\text{FMS} = 100 \cdot \frac{A_\mu \cap A_{\pi(c)}}{A_\mu \cup A_{\pi(c)}}. \quad (\text{A.2.10})$$

Une valeur élevée indique un bon accord, mais une petite valeur n'est pas une preuve de la mauvaise performance. Un petit décalage entre les deux nuages suffit pour détériorer les valeurs de FMS significativement.

L'indice de mérite en temps est calculé pour une série temporelle, j , de données dans une station :

$$\text{FMT} = 100 \cdot \frac{\sum_j \min \{ \mu_j, \pi_j(c) \}}{\sum_j \max \{ \mu_j, \pi_j(c) \}}. \quad (\text{A.2.11})$$

La définition de l'indice de mérite se généralise clairement à toutes les mesures :

$$\text{FM} = 100 \cdot \frac{\sum_{i=1}^d \min (\mu_i, \pi_i(c))}{\sum_{i=1}^d \max (\mu_i, \pi_i(c))}. \quad (\text{A.2.12})$$

A.3 Configuration de domaines de calcul pour POLAIR3D

A.3.1 L'expérience ETEX

Domaine du calcul

À l'origine nous utilisons les champs météorologiques ERA-40 de résolution $1.125^\circ \times 1.125^\circ$ disponibles chaque 3 heures avec des champs analysés et des champs de prévision qui viennent en alternance. Ces champs ont été interpolés sur le domaine de calcul dont résolution horizontale est $0.5^\circ \times 0.5^\circ$, et qui est maillé par 12 niveaux verticaux. La préparation de champs météorologiques se fait avec la bibliothèque ATMODATA, [Mallet et Sportisse, 2005].

Le domaine est défini par $[19^\circ 45' 30'' \text{ W}, 14^\circ 44' 30'' \text{ E}] \times [37^\circ 18' 30'' \text{ N}, 72^\circ 18' 30'' \text{ N}]$. Ainsi, le point source, qui se trouve à $(40^\circ 03' 30'' \text{ N}, 2^\circ 00' 30'' \text{ W})$ coïncide avec le centre d'une des mailles. Le domaine de calcul est couvert par $N_x = 137$ mailles selon l'axe X et $N_y = 70$ mailles selon l'axe Y . Le pas de temps d'advection est 10 min et $N_t = 990$.

Remarquons que PMCH est un traceur inerte et par conséquent il est transporté dans l'atmosphère sans subir de processus de perte.

A.3.2 Le rejet de Tchernobyl

Domaine du calcul

Les champs météorologiques ERA-40 ont une résolution temporelle de 3 heures et alternent des champs en mode de prévision et des champs analysés. La résolution horizontale $1.125^\circ \times 1.125^\circ$ coïncide avec celle du domaine de calcul. L'étendue du domaine est donnée par des intervalles $[10^\circ 33' 45'' \text{ W}, 63^\circ 26' 30'' \text{ E}] \times [34^\circ 26' 15'' \text{ N}, 69^\circ 18' 45'' \text{ N}]$. Le maillage horizontal consiste en $N_x \cdot N_y = 66 \cdot 31$ cellules. 61 niveaux verticaux d'un champ météorologique sont projetés sur le maillage vertical du domaine, on occurrence 12 niveaux distribués non-uniformément : 62, 236, 484, 796, 1184, 1616, 1984, 2616, 3184, 3616, 4384 et 5016 mètres. Le pas de temps d'intégration est 10 minutes et $N_t = 1872$.

Processus physiques

Nous avons pris en compte le dépôt sec avec les valeurs de la vitesse de dépôt suivantes : $v_d = 0.5 \text{ cm.s}^{-1}$ pour ^{131}I et $v_d = 0.2 \text{ cm.s}^{-1}$ pour ^{137}Cs . Les constantes de la décroissance radioactive ont été obtenues selon la formule :

$$\lambda = \log(2)/T_{\frac{1}{2}},$$

où $T_{\frac{1}{2}}$ est le temps de demie-vie, voir section 2.3.1. Pour les deux éléments radioactifs suivis elles valent : $\lambda_{^{131}\text{I}} = 9.978280 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ et $\lambda_{^{137}\text{Cs}} = 7.321503 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$. Le lessivage est modélisé par un modèle du type Belot :

$$\Lambda = A p_0^B, \quad (\text{A.3.1})$$

en supposant la matière exclusivement en forme gazeuse et en prenant $A = 8.0 \times 10^{-5}$ et $B = 0.8$, selon des recommandations de [Päsler-Sauer, 2003].

Terme source

Le terme source est localisé à Tchernobyl, ($51^{\circ}17' N$, $30^{\circ}15' E$). Nous présentons dans le tableau A.3.1 ci-dessous son évolution et sa distribution verticale.

Date	26/4	27/4	28/4	29/4	30/4	1/5	2/5	3/5	4/5	5/5
Frac	0.40	0.116	0.085	0.058	0.039	0.035	0.058	0.061	0.074	0.074
z_1	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
z_2	0.	0.	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
z_3	0.	0.1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
z_4	0.	0.5	0.3.	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
z_5	0.4	0.4	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
z_6	0.3	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
z_7	0.2	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
z_8	0.1	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.

TAB. A.3.1 – Distribution temporelle et verticale du terme source de Tchernobyl. À chaque jour du rejet on associe une fraction (Frac) de l'émission totale, 1760×10^{15} Bq pour ^{131}I et 85×10^{15} Bq pour ^{137}Cs . La distribution verticale de la quantité émise le jour donné est présentée dans une colonne. Les niveaux de z indiqués (les centres de mailles) sont : 32, 150, 360, 640, 990, 1400, 1800 et 2300 mètres

A.3.3 L'incident d'Algésiras

Configuration

Le domaine est défini par $[18^{\circ}15' W, 27^{\circ}15' E] \times [26^{\circ}45' N, 59^{\circ}45' N]$. Il est maillé par le maillage comprenant 91×66 cellules sur chaque de 14 niveaux verticaux. Le domaine couvre le lieu d'accident ($5^{\circ}26' W, 36^{\circ}10' N$) et toute la région de provenance des mesures collectées. On utilise des champs ECMWF opérationnels de fréquence 6h et de résolution spatiale $0.5^{\circ} \times 0.5^{\circ}$ qui coïncide avec la résolution du domaine de calcul. En utilisant des informations fournies dans [Vogt *et al.*, 1998] et [Baklanov, 1999], on impose le rejet entre 01h30 et 02h00, le 30 mai 1998. La quantité rejetée est égale à $50 \text{ Ci} = 1.85 \times 10^{12}$ Bq et tombe dans l'intervalle des valeurs estimées du terme source, fournies dans la phase post-accidentelle. À cause de l'élévation du point de rejet ayant pour l'origine la cheminée, la source a été placée au deuxième niveau. La simulation est effectuée avec $N_t = 4140$ pas de temps de 10 min.

Processus physiques

Parmi les processus incorporés par le modèle, nous avons pris en compte le dépôt sec avec la vitesse $v_d = 0.1 \text{ cm.s}^{-1}$. Le manque d'information concernant les précipitations dans les champs opérationnels a éliminé le lessivage de cette simulation. Il est connu par ailleurs qu'il n'y a pas eu de pluies importantes pendant les premières jours après le rejet. La décroissance radioactive de ^{137}Cs a été prise en compte avec la constante radioactive $\lambda = 7.321503 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1}$.

A.3.4 Simulations d'accidents hypothétiques

Les accidents inversés dans cette étude sont simulés dans un domaine défini par des intervalles $[27^{\circ}15' W, 54^{\circ}45' E] \times [24^{\circ}45' N, 73^{\circ}45' N]$. Le domaine spatio-temporel est

décomposé en N mailles ($N_x = 164$, $N_y = 98$, $N_z = 14$, et $N_t = 1008$ respectivement pour chaque dimension). Deux périodes pour la simulation d'accident ont été choisies, 2 – 9 mai et 2 – 9 octobre 2001. Les champs météorologiques ERA-40 ont été préparés à l'aide de la bibliothèque ATMODATA et à la sortie ils ont une résolution spatiale $0.5^\circ \times 0.5^\circ$. Ils s'étalent sur 14 niveaux de hauteur variable dont le dernier dépasse 6000 m. Ils sont disponibles chaque 3 heures et viennent en alternance comme des champs analysés et des champs de prévision.

Processus physiques

Nous prenons en compte les processus d'appauvrissement, selon les schémas décrits dans la section 2.3.1. La vitesse du dépôt sec pour des rejets hypothétiques de ^{131}I a été choisie égale à $v_d = 0.1 \text{ cm.s}^{-1}$, d'après [Brandt *et al.*, 2002]. Le lessivage est modélisé selon le schéma de Belot avec $\alpha = \frac{3}{4}$ qui exprime la proportion de la phase gazeuse et $(1 - \alpha) = \frac{1}{4}$ qui reflète la proportion de particules. Les valeurs de coefficients A et B sont $A = 4.0 \times 10^{-5}$ et $B = 0.6$ selon des recommandations de Belot.

Annexe B

Modélisation directe et inverse pour la soufflerie

B.1 Configuration des simulations pour la soufflerie

B.1.1 Géométrie du domaine de calcul

Dans le cadre de travaux présentés ici le modèle direct à bouffées, (2.2.5), a été adapté pour décrire l'expérience dans la soufflerie. Le pas de temps d'advection Δt_{advect} vaut 10 s et est égale à celui d'émission de bouffées, Δt_{emiss} . La longueur de l'intervalle de temps est $T = 2000$ s et par conséquent 200 bouffées sont émises. Ceci est suffisant pour établir un régime stationnaire dans tout le domaine et, par ailleurs, un certain nombre des bouffées est déjà sorti du domaine à la fin de l'intervalle T.

Le calcul est fait dans la configuration de la soufflerie, ce qui correspond à un repère centré sur le bâtiment réacteur 2, avec $x_{BR2} = 0 = y_{BR2}$, voir figure B.1.1. L'axe X est dirigé selon la direction du vent, l'axe Y est perpendiculaire à l'axe X et orienté de manière à obtenir un repère direct. Les distances sont celles d'un site réel. Le domaine de calcul dans ce repère est alors $[-100; 5000] \times [-1000; 1000] \text{ m}^2$. Nous plaçons la source ponctuelle - la cheminée - à $(x_{CH} = 74\text{m}, y_{CH} = 5\text{m})$ pour le vent du sud et à $(x_{CH} = -74\text{m}, y_{CH} = -5\text{m})$ pour le vent du nord (bien que physiquement, sur le site réel, il s'agit de la même cheminée qui ne change pas sa position). La hauteur de la source est $z_{CH} = 55\text{m}$.

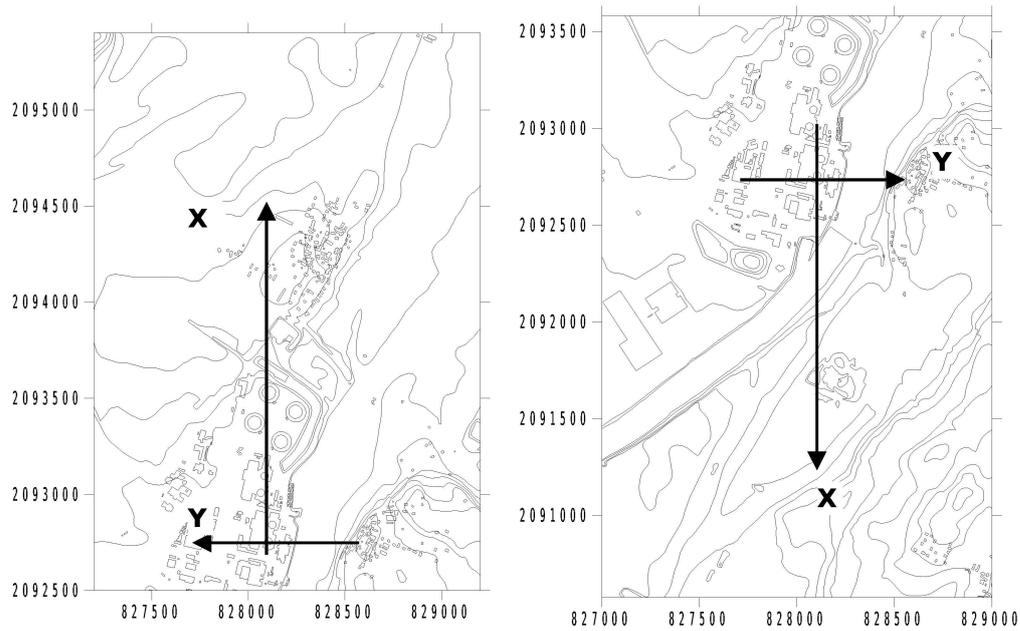


FIG. B.1.1 – La figure à gauche montre le repère pour le vent du sud, celle à droite pour le vent du nord (remerciements à l'ECL). Les deux repères sont centrés sur le bâtiment réacteur qui a servi comme source diffuse. Coordonnées Lambert II étendues

B.1.2 Valeurs de paramètres physiques

Le débit de la source a été emmené à $\dot{q} = 1 \text{ Bq.s}^{-1}$. L'expérience dans la soufflerie fournit des valeurs de la vitesse du vent à l'entrée du domaine : $u = 3 \text{ m.s}^{-1}$, $v = 0 \text{ m.s}^{-1}$ et $w = 0 \text{ m.s}^{-1}$. La hauteur de la couche limite atmosphérique a été choisie égale à $h_{ABL} = 1000 \text{ m}$, $z_g = 0 \text{ m}$ et $\text{stab} = 0.07$ pour prendre en compte la légère stabilité de la couche limite dans la soufflerie.

Le calcul est donc mené avec les vraies valeurs des paramètres d'entrée qui proviennent soit des mesures dans la soufflerie comme le débit et la vitesse du vent, soit des valeurs par défaut des paramètres de turbulence entrant dans le modèle de Doury.

B.1.3 Paramétrisation de la turbulence

Les paramètres de la turbulence ont été choisis égale à leurs valeurs standard. Ceux parmi eux qui décrivent la diffusion horizontale se trouvent dans le tableau B.1.1.

$s_h < 51 \text{ m}$	$s_h < 44909 \text{ m}$	$s_h < 235204 \text{ m}$	$s_h < 510188 \text{ m}$	
A_h^1	A_h^2	A_h^3	A_h^4	A_h^5
0.405	0.135	0.463	6.5	200000
k_h^1	k_h^2	k_h^3	k_h^4	k_h^5
0.859	1.13	1.0	0.824	0.5

TAB. B.1.1 – Paramètres de la diffusion horizontale

Les valeurs des paramètres de la turbulence pour la diffusion verticale sont pré-

sentées dans les tableaux B.1.2 et B.1.3. Le premier concerne la diffusion normale, le deuxième la diffusion faible.

$s_h < 43$ m	$s_h < 256$ m	
A_z^1	A_z^2	A_z^3
0.42	1.0	20.0
k_z^1	k_z^2	k_z^3
0.814	0.685	0.685

TAB. B.1.2 – Paramètres de la diffusion verticale normale

A_z^1
0.2
k_z^1
0.5

TAB. B.1.3 – Paramètres de la diffusion verticale faible

B.1.4 Coordonnées des stations de mesure

Position		Mesure
x[m]	y[m]	[Bq.m ⁻³]
450	0	1.397×10^{-5}
850	0	1.772×10^{-5}
1150	-250	1.477×10^{-6}
1150	250	5.060×10^{-8}
1450	-100	9.561×10^{-6}
1750	-500	0.0
1750	-200	5.489×10^{-6}
1750	200	1.780×10^{-6}
2100	250	5.195×10^{-7}
2500	-200	5.543×10^{-6}

TAB. B.1.4 – Positions des points de mesure constituant le réseau pour le vent du **sud**. Valeurs des mesures en ces points

Position		Mesure
x[m]	y[m]	[Bq.m ⁻³]
120	0	4.14×10^{-6}
200	-10	1.18×10^{-5}
200	100	2.34×10^{-7}
300	0	1.42×10^{-5}
625	75	2.87×10^{-6}
850	-150	1.30×10^{-5}
1150	200	1.57×10^{-7}
1450	-100	8.55×10^{-6}
1750	100	2.23×10^{-6}
2100	-300	4.89×10^{-6}

TAB. B.1.5 – Positions des points de mesure constituant le réseau pour le vent du **nord**. Valeurs des mesures en ces points

B.1.5 Paramètres de l'assimilation de données

Dans les cas des tests sur des expériences synthétiques, l'erreur de mesure $s_{o,i}$ a été choisie égale à 10^{-8} pour toute mesure i . Ceci n'influence pas le minimum de la fonction coût mais a pour conséquence des valeurs raisonnables de J . Pour des mesures effectuées dans la soufflerie, $s_{o,i}$ a été choisi d'un ordre de grandeur plus petite que la mesure correspondante μ_i . Par conséquent, des grands poids ont été attribués aux mesures importantes et petits poids aux petites mesures.

B.2 Assimilation de données pour la soufflerie

B.2.1 Tangent linéaire et adjoint pour la fonction coût

Avant d'expliquer les avantages de l'approche basée sur le mode adjoint, penchons nous sur la fonction coût comme elle est définie par l'équation (3.1.1). J est une application qui va de \mathbb{R}^p dans \mathbb{R} :

$$J: \mathbb{R}^p \ni \mathbf{X} \longrightarrow J(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}, \quad (\text{B.2.1})$$

où la dimension de l'espace de départ p dépend du nombre des paramètres optimisés. Dans cette application particulière le vecteur d'état \mathbf{X} est composé de jusqu'à 5 éléments, $\mathbf{X} = (\dot{q}, u, v, A_h^1, A_h^2)$, mais une généralisation à un nombre plus élevé est directe. L'espace d'arrivée \mathbb{R} est de dimension 1 et le choix du mode adjoint est lié à sa petite dimension.

La fonction coût peut-être vue comme un composé de plusieurs applications. En effet, J se décompose en $J = S \circ B \circ A \circ \chi$ où :

$$\begin{aligned} \chi: \mathbb{R}^p \ni \mathbf{X} &\longrightarrow \chi(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}^d \\ A: \mathbb{R}^d \ni \chi(\mathbf{X}) &\longrightarrow (\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^d \\ B: \mathbb{R}^d \ni (\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}) &\longrightarrow \begin{pmatrix} [\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}]^T \\ [\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}] \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \\ S: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \ni ([\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}]) &\longrightarrow [\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}]^T \cdot [\chi(\mathbf{X}) - \boldsymbol{\mu}] \in \mathbb{R}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.2})$$

où chacune composante du vecteur χ désigne la prévision du modèle à bouffées χ , équation (2.2.5), en un point de mesure et par conséquent d est égal au nombre de mesures.

Rappelons qu'une dérivée d'une application :

$$\chi: \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}^d,$$

est une application

$$D\chi: \mathbb{R}^p \longrightarrow L(\mathbb{R}^p, \mathbb{R}^d).$$

C'est donc seulement $D\chi$ évaluée en un point quelconque, $\mathbf{X}_0 \in \mathbb{R}^p$ qui est une application linéaire :

$$D\chi(\mathbf{X}_0) \in L(\mathbb{R}^p, \mathbb{R}^d).$$

Cette dernière prend comme argument un vecteur $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^p$ et produit $D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$. Ici l'indice 0 désigne non pas le temps mais un ensemble figé de paramètres.

Ayant en tête ce rappel, nous allons présenter la forme matricielle des dérivées des quatre applications, formule (B.2.2). Soit donc $\mathbf{X}_0 \in \mathbb{R}^p$. L'argument de dérivées de ces applications sera noté \mathbf{h} bien que pour toute application il s'agit d'un vecteur différent. Pour la première d'entre elles, χ , prenons $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^p$. Nous avons :

$$D\chi(\mathbf{X}_0): \mathbb{R}^p \ni \mathbf{h} \longrightarrow D(\chi(\mathbf{X}_0)) \cdot \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d. \quad (\text{B.2.3})$$

Dans ce cas on omet la forme explicite de $D\chi(\mathbf{X}_0)$ qui sera discutée dans la section B.2.2.

Ensuite, puisque A est une application affine, $DA(\chi(\mathbf{X}_0))$ est l'application linéaire correspondante, l'identité en occurrence. Par conséquent, pour un $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$ on obtient :

$$DA(\chi(\mathbf{X}_0)) : \mathbb{R}^d \ni \mathbf{h} \longrightarrow \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d. \quad (\text{B.2.4})$$

Puis, la dérivée de l'application B au point $(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu})$ s'exprime :

$$DB([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) : \mathbb{R}^p \ni \mathbf{h} \longrightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{h}^T \\ \mathbf{h} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d. \quad (\text{B.2.5})$$

Finalement, la dérivée de S s'écrit :

$$\begin{aligned} DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \ni \begin{pmatrix} \mathbf{h}_1^T \\ \mathbf{h}_2 \end{pmatrix} \longrightarrow \\ \mathbf{h}_1^T \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] + [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T \cdot \mathbf{h}_2 \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (\text{B.2.6})$$

Dans ces formules “.” en bas d'une ligne signifie l'action d'un opérateur sur un vecteur, et “.” au centre d'une ligne signifie le produit scalaire dans \mathbb{R}^d .

Mode tangent linéaire

Le calcul de la dérivée en mode direct nécessite l'exécution du code tangent linéaire autant de fois que le nombre de paramètres optimisés. Soit en effet $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^p$. La dérivée de J au point \mathbf{X}_0 , qui est une application linéaire :

$$DJ(\mathbf{X}_0) : \mathbb{R}^p \longrightarrow \mathbb{R}$$

s'exprime par :

$$DJ(\mathbf{X}_0) = DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) \cdot DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}) \cdot DA(\chi(\mathbf{X}_0)) \cdot D\chi(\mathbf{X}_0),$$

et par conséquent :

$$\begin{aligned} DJ(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h} &= \left(\frac{\partial J}{\partial X_1}(\mathbf{X}_0), \dots, \frac{\partial J}{\partial X_p}(\mathbf{X}_0) \right) \cdot \mathbf{h} \\ &= DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) \cdot DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}) \cdot DA(\chi(\mathbf{X}_0)) \cdot D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h} \\ &= DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) \cdot DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}) \cdot D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h} \\ &= DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]) \cdot \begin{pmatrix} [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}]^T \\ [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}] \end{pmatrix} \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}]^T \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] + [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T \cdot [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}] \quad (\text{B.2.7}) \end{aligned}$$

Le résultat ci-dessus a été obtenu en prenant comme argument des dérivées successivement : \mathbf{h} dans la formule (B.2.3), $D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}$ dans la formule (B.2.4) et ensuite dans la formule (B.2.5), et finalement :

$$\begin{pmatrix} [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}]^T \\ [D\chi(\mathbf{X}_0) \cdot \mathbf{h}] \end{pmatrix},$$

dans la formule (B.2.6) à la place de :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{h}_1^T \\ \mathbf{h}_2 \end{pmatrix}.$$

On remarque donc que les composantes du gradient de J peuvent être retrouvées en faisant des bons choix de vecteur \mathbf{h} , en prenant p vecteurs de la base canonique $(1, \dots, 0)$, $(0, 1, \dots, 0)$, \dots , $(0, \dots, 0, 1)$. Pour obtenir les p composantes du gradient, p exécutions de $D\chi(\mathbf{X}_0)$ sont nécessaires.

Mode adjoint

Imaginons maintenant qu'on calcule la dérivée de la fonction J dans un mode adjoint. On regarde donc, en un même point $\mathbf{X}_0 \in \mathbb{R}^p$ que ci-dessus, l'application linéaire :

$$[DJ(\mathbf{X}_0)]^T : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^p$$

qui s'exprime à l'aide :

$$\begin{aligned} [DJ(\mathbf{X}_0)]^T &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot [DA(\chi(\mathbf{X}_0))]^T \cdot [DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu})]^T \cdot \\ &\quad [DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}])]^T \end{aligned} \quad (\text{B.2.8})$$

Visualisons maintenant cette formule plus explicitement. Soit $h \in \mathbb{R}$. Par conséquent nous avons :

$$\begin{aligned} DJ(\mathbf{X}_0)^T \cdot h &= \begin{pmatrix} \frac{\partial J}{\partial X_1}(\mathbf{X}_0) \\ \vdots \\ \frac{\partial J}{\partial X_p}(\mathbf{X}_0) \end{pmatrix} \cdot h \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot [DA(\chi(\mathbf{X}_0))]^T \cdot [DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu})]^T \cdot \\ &\quad [DS([\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T, [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}])]^T \cdot h \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot [DA(\chi(\mathbf{X}_0))]^T \cdot [DB(\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu})]^T \cdot \\ &\quad \begin{pmatrix} [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}]^T \\ [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] \end{pmatrix} \cdot h \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot [DA(\chi(\mathbf{X}_0))]^T \cdot (h \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] + [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] \cdot h) \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot (h \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] + [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] \cdot h) \\ &= [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot (h \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] + [D\chi(\mathbf{X}_0)]^T \cdot [\chi(\mathbf{X}_0) - \boldsymbol{\mu}] \cdot h). \end{aligned} \quad (\text{B.2.9})$$

Ici “.” en bas d'une ligne désigne l'action d'opérateur et “.” au milieu d'une ligne le produit d'un vecteur de \mathbb{R}^d par un scalaire, h en l'occurrence.

En analysant la formule ci-dessus, nous nous rendons compte que dans le mode adjoint il suffit d'exécuter $[D\chi(\mathbf{X}_0)]^T$ avec $h = 1$ une seule fois pour obtenir toutes les composantes de la dérivée. Pour rendre des résultats identiques à ceux fournis par le tangent linéaire, il faut que les dérivées soient calculées en même point \mathbf{X}_0 .

B.2.2 Adjoint du modèle à bouffées

Pour l'instant nous nous sommes concentrés sur la fonction coût. Il nous reste néanmoins une étape importante qui consiste à calculer la dérivée du modèle à bouffées $[D\chi(\mathbf{X}_0)]^T$ par rapport aux composantes du vecteur d'état.

Prenons la i -ème bouffée présente dans le domaine à l'instant t_n . Soit n_i le temps de son émission. Puisque nous allons nous focaliser sur cette bouffée, nous omettons pour l'instant l'indice i par laquelle elle est désignée. La position $(x_{p,n}, y_{p,n}, z_{p,n})$ et sa taille $(s_{h,n}, s_{z,n})$ évoluent selon l'action des opérateurs décrivant l'advection et la diffusion.

L'advection :

$$\text{Adv}_{n_i+1} : (x_{p,n_i}, y_{p,n_i}, z_{p,n_i}; u, v, w) \longrightarrow (x_{p,n_i+1}, y_{p,n_i+1}, z_{p,n_i+1}), \quad (\text{B.2.10})$$

agit selon le système d'équations (2.2.2). Si on restreint notre attention à l'évolution selon l'axe X , alors on peut exprimer Adv_{x,n_i+1} sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} u_{n_i+1} \\ x_{p,n_i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \Delta t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n_i} \\ x_{p,n_i} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2.11})$$

Remarquons qu'en écrivant ainsi nous considérons la composante u du champ de vent comme une composante du vecteur d'état. Puisqu'il s'agit d'une application linéaire, sa dérivée coïncide avec l'application elle-même et le mode adjoint se résume à prendre la transposition selon :

$$\begin{pmatrix} h_{u_{n_i}} \\ h_{x_{p,n_i}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \Delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{u_{n_i+1}} \\ h_{x_{p,n_i+1}} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.12})$$

où le vecteur $(h_{u_{n_i+1}}, h_{x_{p,n_i+1}})$ représente des accroissements liés aux variables par rapport auxquelles on dérive.

La diffusion est donnée par les équations (2.2.3) et (2.2.4) :

$$\text{Diff}_{n_i+1} : (s_{h,n_i}, s_{z,n_i}; A_h, k_h, A_z, k_z) \longrightarrow (s_{h,n_i+1}, s_{z,n_i+1}). \quad (\text{B.2.13})$$

Le processus de la croissance des bouffées étant non linéaire, nous allons écrire ici seulement l'adjoint qui survient suite à la linéarisation de la diffusion horizontale :

$$\begin{pmatrix} h_{A_h, n_i} \\ h_{s_h, n_i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & k_h (s_{h, n_i})^{\frac{k_h-1}{k_h}} + A_{h, n_i} (k_h - 1) (s_{h, n_i})^{-\frac{1}{k_h}} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{A_h, n_i+1} \\ h_{s_h, n_i+1} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2.14})$$

Comme pour le champ de vent dans le processus d'advection, nous considérons ici qu'un de paramètres du modèle de Doury, A_h fait partie du vecteur d'état. Ceci aurait pu être également le cas pour d'autres paramètres, k_h, A_z, k_z . Dans la formule (B.2.14) $(h_{A_h, n_i+1}, h_{s_h, n_i+1})$ est un vecteur d'accroissements qui est transporté par le modèle adjoint et qui est associé aux dérivées par rapport à A_h et s_h . Remarquons encore que l'opérateur adjoint, équation (B.2.14), fait évoluer le vecteur d'état entre t_{n_i+1} et t_{n_i} mais il est évalué en t_{n_i} et s'appuie sur (A_h, n_i, s_h, n_i) . Cette remarque est en fait plus générale et implique la nécessité de connaître les valeurs de variables d'état avant que le modèle adjoint puisse être exécuté. Une exécution du modèle direct accompagnée d'une

sauvegarde des valeurs de variables d'état sont donc nécessaires avant que l'adjoint ne puisse démarrer.

La i -ème bouffée, née à l'instant t_{n_i} , est advectée et diffusée jusqu'à l'instant t_n , le moment du calcul de prévisions modèle. Notons, que pour l'expérience stationnaire dans la soufflerie, t_n est arbitraire. Il suffit que ceci soit l'instant où le régime stationnaire dans le domaine du calcul a été déjà atteint.

Dans l'application particulière discutée dans le chapitre 3 on dérive seulement par rapport aux composantes horizontales de la vitesse du vent et par rapport à un de paramètres du modèle de Doury pour la diffusion horizontale, A_h . Par conséquent l'action successive des opérateurs Adv et Diff entre t_{n_i} et t_{n-1} est notée avec "o" et elle s'écrit symboliquement :

$$\begin{pmatrix} u_n \\ v_n \\ x_{p,n} \\ y_{p,n} \\ z_{p,n} \\ A_{h,n} \\ s_{h,n} \\ s_{z,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Adv}_{n-1} \\ \text{Diff}_{n-1} \end{pmatrix} \circ \dots \circ \begin{pmatrix} \text{Adv}_{n_i} \\ \text{Diff}_{n_i} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{n_i} \\ v_{n_i} \\ x_{p,n_i} \\ y_{p,n_i} \\ z_{p,n_i} \\ A_{h,n_i} \\ s_{h,n_i} \\ s_{z,n_i} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.15})$$

Les cinq premières composantes du vecteur sont transportées par l'advection, les deux suivantes par la diffusion. Remarquons que l'argument initial du processus de développement de bouffées, $(u_{n_i}, v_{n_i}, x_{p,n_i}, y_{p,n_i}, z_{p,n_i}, A_{h,n_i}, s_{h,n_i}, s_{z,n_i})$ est déterminée par la position de la source et la taille initiale d'une bouffée qui est également liée à la forme de la source. Si en plus la vitesse du vent est constante, alors les arguments initiaux coïncident pour toutes les bouffées, peu importe le temps de leur émission t_{n_i} . L'adjoint de ce transport s'écrit :

$$\begin{pmatrix} h_{u_{n_i}} \\ h_{v_{n_i}} \\ h_{x_{p,n_i}} \\ h_{y_{p,n_i}} \\ h_{z_{p,n_i}} \\ h_{A_{h,n_i}} \\ h_{s_{h,n_i}} \\ h_{s_{z,n_i}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [D\text{Adv}_{n_i}]^T \\ [D\text{Diff}_{n_i}]^T \end{pmatrix} \circ \dots \circ \begin{pmatrix} [D\text{Adv}_{n-1}]^T \\ [D\text{Diff}_{n-1}]^T \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h_{u_n} \\ h_{v_n} \\ h_{x_{p,n}} \\ h_{y_{p,n}} \\ h_{z_{p,n}} \\ h_{A_{h,n}} \\ h_{s_{h,n}} \\ h_{s_{z,n}} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.16})$$

Ensuite, à l'instant t_n , la forme géométrique d'une bouffée est calculée à la base du vecteur $(x_{p,n}, y_{p,n}, z_{p,n}, s_{h,n}, s_{z,n})$. Il s'agit du calcul des exponentielles apparaissant dans la formule (2.2.5) que nous notons respectivement G_x, G_y, G_z, G_{z_g} et $G_{z_{\text{ABL}}}$. Pour donner un exemple, présentons l'opérateur décrivant la forme géométrique de la bouffée selon l'axe X :

$$G_x : (x; x_{p,n}, s_{h,n}) \longrightarrow g_x = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s_{h,n}} \exp\left(-\frac{(x - x_{p,n})^2}{2s_{h,n}^2}\right), \quad (\text{B.2.17})$$

avec x dénotant la position où on cherche à calculer la concentration. Les opérateurs G_y, G_z, G_{z_g} et $G_{z_{\text{ABL}}}$ sont construits de la manière analogue. Nous n'allons plus donner

des formes exactes de l'adjoint de ces opérateurs. Précisément pour éviter cela nous nous appuyons sur un différenciateur automatique. Nous allons donc, pour les besoins de cette présentation, nous limiter à la notation symbolique. Notons la linéarisation de G_x par DG_x . L'adjoint $[DG_x]^T$, évalué en point $(x_{p,n}, s_{h,n})$, transforme h_{g_x} :

$$\begin{pmatrix} h_{x_{p,n}} \\ h_{s_{h,n}} \end{pmatrix} = [DG_x]^T \cdot (h_{g_x}) \quad (\text{B.2.18})$$

et dans sa forme matricielle il consiste en deux lignes et une colonne. Les contributions $(g_x, g_y, g_z, g_{z_g}, g_{z_{ABL}})$ interviennent ensuite dans le modèle à bouffées, équation 2.2.5, selon :

$$G : (g_x, g_y, g_z, g_{z_g}, g_{z_{ABL}}) \longrightarrow g = g_x \cdot g_y \cdot [g_z + g_{z_g} + g_{z_{ABL}}]. \quad (\text{B.2.19})$$

De nouveau, en écrivant de manière symbolique l'action de l'adjoint $[DG]^T$ sur h_g , nous avons :

$$\begin{pmatrix} h_{g_x} \\ h_{g_y} \\ h_{g_z} \\ h_{g_{z_g}} \\ h_{g_{z_{ABL}}} \end{pmatrix} = [DG]^T \cdot (h_g) \quad (\text{B.2.20})$$

Nous allons maintenant écrire de manière symbolique le développement de la i -ème bouffée, depuis sa naissance, jusqu'au moment t_n où on calcule les sorties de modèle. Nous renouons avec l'exposant i pour désigner cette bouffée :

$$\chi^{(i)} = G^{(i)} \circ \begin{pmatrix} G_x^{(i)} \\ G_y^{(i)} \\ G_z^{(i)} \\ G_{z_g}^{(i)} \\ G_{z_{ABL}}^{(i)} \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} \text{Adv}_{n-1}^{(i)} \\ \text{Diff}_{n-1}^{(i)} \end{pmatrix} \circ \dots \circ \begin{pmatrix} \text{Adv}_{n_i+1}^{(i)} \\ \text{Diff}_{n_i+1}^{(i)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.2.21})$$

L'adjoint de $\chi^{(i)}$, écrit également de manière symbolique, prend la forme :

$$[D\chi^{(i)}]^T = \begin{pmatrix} [D\text{Adv}_{n_i+1}^{(i)}]^T \\ [D\text{Diff}_{n_i+1}^{(i)}]^T \end{pmatrix} \circ \dots \circ \begin{pmatrix} [D\text{Adv}_{n-1}^{(i)}]^T \\ [D\text{Diff}_{n-1}^{(i)}]^T \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} [DG_x^{(i)}]^T \\ [DG_y^{(i)}]^T \\ [DG_z^{(i)}]^T \\ [DG_{z_1}^{(i)}]^T \\ [DG_{z_{ABL}}^{(i)}]^T \end{pmatrix} \circ [DG^{(i)}]^T \quad (\text{B.2.22})$$

Remarquons que $[DG^{(i)}]^T$ fait transporter h_g vers $(h_{g_x}, h_{g_y}, h_{g_z}, h_{g_{z_g}}, h_{ABL})$, selon la formule (B.2.20). Ces variables à leur tour, après être transportées par

$$[DG_x^{(i)}]^T, \dots, [DG_{z_{ABL}}^{(i)}]^T$$

conduisent à $(h_{x_{p,n}}, h_{y_{p,n}}, h_{z_{p,n}}, h_{s_{h,n}}, h_{s_{z,n}})$. En ce moment il faut initialiser les accroissements $(h_{u_n}, h_{v_n}, h_{A_{h,n}})$. Pour les données de la soufflerie $A_{h,n}$ prend deux valeurs, $A_{h,n}^1$ et $A_{h,n}^2$ et par conséquent le vecteur d'accroissements prend la forme

$(h_{u_n}, h_{v_n}, h_{A_{h,n}})$ avec $h_{A_{h,n}} = (h_{A_{h,n}^1}, h_{A_{h,n}^2})$. Donc le vecteur complet d'accroissements qui seront transportés par un composé des adjoints de l'advection et diffusion prend la forme :

$$(h_{u_n}, h_{v_n}, h_{x_{p,n}}, h_{y_{p,n}}, h_{x_{p,n}}, h_{A_{h,n}^1}, h_{A_{h,n}^2}, h_{s_{h,n}}, h_{s_{z,n}})$$

pour récupérer :

$$(h_{u_{n_i}}, h_{v_{n_i}}, h_{x_{p,n_i}}, h_{y_{p,n_i}}, h_{z_{p,n_i}}, h_{A_{n_i}^1}, h_{A_{n_i}^2}, h_{s_{h,n_i}}, h_{s_{z,n_i}}).$$

Notons que les opérations décrites ci-dessus sont exécutées dans le code en parallèle sur toutes les bouffées présentes dans le domaine. Seulement à l'instant t_n , celui du calcul de l'activité volumiques, la position de centres de masse et la taille de chacune des bouffées sont utilisées pour calculer des gaussiennes.

Maintenant nous allons nous focaliser sur la dernière étape, celle du calcul de l'activité volumique à partir de toutes les bouffées présentes dans le domaine. Nous allons les indexer par $i \in \{1, \dots, N_{\text{puff}}\}$. La dernière étape consiste à sommer des contributions de toutes les bouffées en les attachant l'activité volumique $\dot{q}^{(i)} \cdot \Delta t$:

$$\begin{aligned} C & : (\dot{q}^{(1)}, g^{(1)}; \dots; \dot{q}^{(i)}, g^{(i)}; \dots; \dot{q}^{(N_{\text{puff}})}, g^{(N_{\text{puff}})}) \\ & \longrightarrow \chi = \dot{q}^{(1)} \cdot \Delta t \cdot g^{(1)} + \dots + \dot{q}^{(i)} \cdot \Delta t \cdot g^{(i)} + \dots + \dot{q}^{(N_{\text{puff}})} \cdot \Delta t \cdot g^{(N_{\text{puff}})}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.23})$$

ou autrement dit :

$$\chi = C \circ \begin{pmatrix} \chi^{(1)} \\ \vdots \\ \chi^{(i)} \\ \vdots \\ \chi^{(N_{\text{puff}})} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2.24})$$

Rappelons que $g^{(i)}$ est donné par la formule (B.2.19) pour la i -ème bouffée et $\dot{q}_p^{(i)} \cdot \Delta t$ est l'activité attachée à la même bouffée. Remarquons qu'on peut multiplier par $\dot{q}_p^{(i)} \cdot \Delta t$ seulement à ce stade parce que les processus d'appauvrissement peuvent être décrits indépendamment de l'évolution de la taille et des centres de masse. Par ailleurs, ils ne sont pas pris en compte par la modélisation de l'expérience dans la soufflerie. Il ne nous reste qu'à décrire l'adjoint de cette dernière étape de la modélisation :

$$\begin{pmatrix} h_{g^{(1)}} \\ h_{\dot{q}^{(1)}} \\ \vdots \\ h_{g^{(i)}} \\ h_{\dot{q}^{(i)}} \\ \vdots \\ h_{g^{(N_{\text{puff}})}} \\ h_{\dot{q}^{(N_{\text{puff}})}} \end{pmatrix} = [DC]^T \cdot (h_\chi) \quad (\text{B.2.25})$$

Si maintenant on veut calculer l'adjoint du modèle à bouffées, il faut imposer le vecteur d'accroissement $h_\chi = 1$ et le transporter par l'équation (B.2.25).

Des accroissements $h_{\dot{q}^{(i)}}$ expriment des dérivées de la concentration par rapport au débit et ne seront pas transformés plus loin. Remarquons que $\dot{q}^{(i)}$ est le débit de la source à l'instant de l'émission de la i -ème bouffée, t_{n_i} . Si ce débit est constant, la dérivée de χ par rapport au débit proviendra de la somme de toutes les contributions. Si le débit était constant par intervalles du temps ou s'il était variable d'autres traitements des accroissements $h_{\dot{q}^{(i)}}$ seraient nécessaires.

Des accroissements $h_{g^{(i)}}$ sont transportés par toute la chaîne des opérateurs de la formule (B.2.22). A priori chacun selon la suite des opérateurs indexés par i qui lui correspondent. Ces opérateurs étant identiques, tous les accroissements sont transportés en parallèle, comme ceci est également le cas pour le flot de variables dans le mode direct.

Remarquons que le rétrotransport commence à l'instant t_n pour toutes les bouffées et se termine à l'instant t_{n_i} , différent pour chacune des bouffées, le moment de la disparition d'une bouffée au point source. La sommation des variables correspondantes doit bien évidemment s'arrêter également en ce moment.

A_h^1, A_h^2 étant des paramètres globaux du modèle, la dérivée par rapport à ces variable surgit de la sommation des contributions $h_{A_h^1, n_j}, h_{A_h^2, n_j}$ à tous les instants de temps et pour toutes les bouffées. Il faut néanmoins faire cela prudemment et sommer des contributions à $h_{A_h^1, n_j}$ aux instants où A_h est donnée par A_h^1 et à $h_{A_h^1, n_j}$ aux instants où A_h est donnée par A_h^2 .

En ce qui concerne le champ de vent on pourrait sortir les $h_{u_n^{(i)}}, h_{v_n^{(i)}}$ pour des centres de masse de toutes les bouffées en tous les instants de temps. La vitesse uniforme aurait imposé de sommations de ces contributions dans de différents endroits spatiales. Si en plus la vitesse est constante, la sommation des accroissements en temps doit être effectuée. Si on considère la vitesse homogène et constante, alors toutes les contributions $h_{u_n^{(i)}}$ doivent être sommées pour obtenir la dérivée par rapport à u et toutes les contributions $h_{v_n^{(i)}}$ pour obtenir la dérivée du modèle à bouffées χ par rapport à u et v respectivement.

Au sein de PX0.1 la concentration provenant d'une bouffée s'écrit symboliquement selon la formule (B.2.24) avec les $\chi^{(i)}$ donnés par la formule B.2.21. Les opérateurs désignés en majuscules sont codés en Fortran77. Le passage des arguments, représenté par les \circ , est effectué au sein d'une structure externe écrite en C. Cette structure étant écrite dans une langage de programmation qui n'est pas comprise par l'adjointisateur automatique que nous utilisons, notamment l'Odyssée, elle limite l'utilité de ce dernier. Bien qu'on peut s'appuyer sur l'adjointisateur automatique pour adjointiser des opérateurs, $DAdv, DDiff, DG_x, \dots, DG, DC$, le flot d'information entre ces routines doit être géré par un programmeur. Ce fait exige d'avoir la bonne compréhension de la totalité du code direct, de l'adjoint et de routines adjointisées automatiquement. Surtout si l'initialisation de variables supplémentaires est nécessaire entre ces routines, comme c'est le cas dans cette application pour des accroissements liés aux dérivées par rapport au champ de vent et des paramètres du modèle de Doury. Il nous semble qu'un outil comme YAO [Thiria *et al.*, 2006] pourrait constituer une aide substantielle à un programmeur pour gérer ce flot de variables correctement de manière automatisée.

B.3 Tableaux des résultats de la modélisation inverse

B.3.1 Inversion et optimisation sur des réseaux de mesures

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur inversée
Inversion de source	3.2.1	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	0.982
Inversion de source	3.2.1	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.090

TAB. B.3.1 – Inversion de la source. Réseaux de 10 stations

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.043
Estimation de paramètres			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.992
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.139
Inversion de source	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.043
Estimation de paramètres			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.438
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.211

TAB. B.3.2 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent pour accordement des profils. Réseaux de 10 mesures

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.2	Sud	1.692×10^7	4.245×10^6	0.251
B.3.2	Nord	2.984×10^7	6.722×10^6	0.225

TAB. B.3.3 – Fonction coût, l'équation (3.1.1), évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : \dot{q}, u, v

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.128
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.813
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.104
			A_h^1	0.405	0.574
			A_h^2	0.135	0.106
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.006
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.340
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.215
			A_h^1	0.405	0.502
			A_h^2	0.135	0.108

TAB. B.3.4 – Inversion de source et optimisation des composantes du vent ainsi que des paramètres de la turbulence pour accordement des profils. Réseaux de 10 mesures

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.4	Sud	1.692×10^7	2.029×10^6	0.120
B.3.4	Nord	2.984×10^7	3.641×10^6	0.122

TAB. B.3.5 – Fonction coût, équation (3.1.1), évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : $\dot{q}, u, v, A_h^1, A_h^2$

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.131
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.027
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.138
			λ_h	1.0	1.094
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.083
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.454
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.216
			λ_h^1	1.0	1.053

TAB. B.3.6 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent et de la turbulence pour accordement des profils. Réseau de 10 observations

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.6	Sud	1.692×10^7	3.643×10^6	0.215
B.3.6	Nord	2.984×10^7	6.009×10^6	0.202

TAB. B.3.7 – Fonction coût, équation (3.1.1), évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : \dot{q}, u, v, λ_h

B.3.2 Optimisation sur toutes les mesures

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	0.954
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.805
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-6.337×10^{-2}
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	0.802
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.259
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.242

TAB. B.3.8 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent pour accordement des profils. **Toutes** les mesures

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.8	Sud	1.692×10^7	3.318×10^6	0.196
B.3.8	Nord	2.984×10^7	4.252×10^6	0.142

TAB. B.3.9 – Fonction coût, équation (3.1.1), évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : \dot{q}, u, v

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.154
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.833
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-6.202 × 10⁻²
			A_h^1	0.405	0.747
			A_h^2	0.135	0.100
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	0.978
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.324
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.249
			A_h^1	0.405	0.678
			A_h^2	0.135	0.103

TAB. B.3.10 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent ainsi que des paramètres de la turbulence pour accordement des profils. **Toutes** les mesures

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.10	Sud	1.692×10^7	1.351×10^6	0.080
B.3.10	Nord	2.984×10^7	2.187×10^6	0.073

TAB. B.3.11 – Fonction coût, équation (3.1.1), évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : $\dot{q}, u, v, A_h^1, A_h^2$

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.317
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.082
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-6.117 × 10⁻²
			λ_h	1.0	1.410
Inversion de source Estimation de paramètres	3.2.2	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.104
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.523
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.270
			λ_h^1	1.0	1.349

TAB. B.3.12 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent et d'un paramètre de la turbulence pour accordement des profils. **Toutes** les mesures

Tab.	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{init}}$	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$	$\frac{J_{\text{all}}^{\text{optim}}}{J_{\text{all}}^{\text{init}}}$
B.3.12	Sud	1.692×10^6	2.141×10^6	0.127
B.3.12	Nord	2.984×10^6	2.905×10^6	0.097

TAB. B.3.13 – Fonction coût, équation 3.1.1, évaluée sur **toutes** les mesures. Les activités volumiques modélisées obtenues avec des valeurs initiales, $J_{\text{all}}^{\text{init}}$, ou optimisées, $J_{\text{all}}^{\text{optim}}$, des paramètres : $\dot{q}, u, v, \lambda_h^1$

B.3.3 L'analyse des réseaux de mesure

Tests selon l'erreur modèle

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	3.439
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.873
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.295
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	2.831
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.936
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.094

TAB. B.3.14 – Inversion de source et optimisation des composantes de la vitesse du vent pour réduction des réseaux à la base de l'erreur modèle. Réseaux de 3 stations de mesure

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	2.209
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.879
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.060
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.261
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.195
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.280

TAB. B.3.15 – Inversion de source et optimisation de composantes de la vitesse de vent pour réduction des réseaux à la base de l'erreur modèle. Réseaux de 4 stations de mesure

Expérience	Section	Vent	Paramètre	vraie Valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	3.485
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.854
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.302
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.139
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.308
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.248

TAB. B.3.16 – Inversion de source et optimisation de composantes de la vitesse de vent pour réduction des réseaux à la base de l'erreur modèle. Réseaux de 5 stations de mesure

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	2.996
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.646
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.341
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.047
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.443
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.212

TAB. B.3.17 – Inversion de source et optimisation de composantes de la vitesse de vent pour réduction des réseaux à la base de l’erreur modèle. Réseaux de 7 stations de mesure

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.104
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.033
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.156
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.030
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.444
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.206

TAB. B.3.18 – Inversion de source et optimisation de composantes de la vitesse de vent pour réduction des réseaux à la base de l’erreur modèle. Réseaux de 9 stations de mesure

Expérience	N_{param}	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$
Tab.B.3.14	3	Sud	7.96×10^7
Tab.B.3.15	4		1.78×10^7
Tab.B.3.16	5		7.21×10^7
Tab.B.3.17	7		8.44×10^7
Tab.B.3.18	9		4.84×10^6
Tab.B.3.2	10		4.25×10^6

TAB. B.3.19 – Fonction coût calculée pour toutes les mesures. Paramètres d’entrée optimisés. Vent du **sud**

Expérience	N_{param}	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$
Tab.B.3.14	3	Nord	9.11×10^7
Tab.B.3.15	4		2.02×10^7
Tab.B.3.16	5		9.94×10^6
Tab.B.3.17	7		6.73×10^6
Tab.B.3.18	9		6.65×10^6
Tab.B.3.2	10		6.72×10^6

TAB. B.3.20 – Fonction coût calculée pour toutes les mesures. Paramètres d’entrée optimisés. Vent du **nord**

Tests croisés de la qualité de mesures

Expérience	Section	Vent	Paramètre	Vraie valeur	Valeur optimisée
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Sud	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.042
			u [m.s ⁻¹]	3.0	3.007
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.136
Inversion de source Estimation de paramètres	3.3	Nord	\dot{q} [Bq.s ⁻¹]	1.0	1.045
			u [m.s ⁻¹]	3.0	2.439
			v [m.s ⁻¹]	0.0	-0.213

TAB. B.3.21 – Inversion de source et optimisation des profils pour l’accordement de profils. Réseau de 7 stations de mesure

Expérience	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$
Tab.B.3.21	Sud	4.16×10^6

TAB. B.3.22 – Fonction coût pour les paramètres optimisés, évaluée sur toutes les mesures. Vent du **sud**

Expérience	Vent	$J_{\text{all}}^{\text{optim}}$
Tab.B.3.21	Nord	6.68×10^6

TAB. B.3.23 – Fonction coût pour les paramètres optimisés, évaluée sur toutes les mesures. Vent du **nord**

Annexe C

Le maximum d'entropie sur la moyenne

C.1 Passage entre la formulation primale et duale

C.1.1 Optimisation de \mathcal{L}

Pour optimiser la fonctionnelle \mathcal{L} , équation (4.1.4), nous allons la dériver par rapport à $p(\boldsymbol{\sigma})$ et, puisqu'on cherche l'extremum, nous allons mettre le résultat à zéro :

$$\begin{aligned}\frac{\delta \mathcal{L}(\boldsymbol{\beta})}{\delta p(\boldsymbol{\sigma})} &= \ln \left[\frac{p(\boldsymbol{\sigma})}{\nu(\boldsymbol{\sigma})} \right] + 1 - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} = 0 \\ \ln \left[\frac{p(\boldsymbol{\sigma})}{\nu(\boldsymbol{\sigma})} \right] &= \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} - 1 \\ p(\boldsymbol{\sigma}) &= \alpha \cdot \nu(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}) \cdot \exp(-1),\end{aligned}\tag{C.1.1}$$

où α est une constante inconnue qu'on cherche à déterminer pour normaliser $p(\boldsymbol{\sigma})$. En sommant sur $\boldsymbol{\sigma}$ on obtient :

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}} p(\boldsymbol{\sigma}) = 1 = \alpha \cdot \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}) \cdot \exp(-1).$$

Par conséquent :

$$\alpha \cdot \exp(-1) = \frac{1}{\sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}.$$

Pour éviter la confusion nous remplaçons l'indice de sommation $\boldsymbol{\sigma}$ par $\boldsymbol{\sigma}'$. L'équation (C.1.1) s'écrit :

$$p(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\nu(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}{\sum_{\boldsymbol{\sigma}'} \nu(\boldsymbol{\sigma}') \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}')},\tag{C.1.2}$$

ce qui correspond à l'expression (4.1.5).

Remarquons que la dérivation de \mathcal{L} par rapport à $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$ se déroule de manière très similaire avec $\zeta(\boldsymbol{\varepsilon})$ et $q(\boldsymbol{\varepsilon})$ jouant bien évidemment le rôle de $p(\boldsymbol{\sigma})$ et $\nu(\boldsymbol{\sigma})$ respectivement. De même $\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}$ est remplacé par $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon}$. Par conséquent on obtient :

$$\zeta(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{q(\boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon})}{\sum_{\boldsymbol{\varepsilon}'} q(\boldsymbol{\varepsilon}') \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\varepsilon}')}. \tag{C.1.3}$$

C.1.2 Exprimer l'entropie secondaire à l'aide de la fonction de partition $Z(\beta)$

On reporte des expressions sur $p(\sigma)$ et $\zeta(\varepsilon)$, (C.1.2) et (C.1.3), dans \mathcal{L} , équation (4.1.4). Dans un premier temps on se restreint au premier et quatrième terme de cette fonctionnelle. On obtient :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} p(\sigma) \ln \left[\frac{p(\sigma)}{\nu(\sigma)} \right] - \beta^T \left(\sum_{\sigma} p(\sigma) \mathbf{H} \sigma \right) \\
= & \sum_{\sigma} \left(\frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \ln \left[\frac{1}{\nu(\sigma)} \cdot \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \right] \right) \\
& - \beta^T \left(\sum_{\sigma} \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \mathbf{H} \sigma \right) \\
= & \sum_{\sigma} \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \ln [\exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)] - \sum_{\sigma} \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \ln [Z_{\sigma'}(\beta)] \\
& - \beta^T \left(\sum_{\sigma} \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \mathbf{H} \sigma \right) \\
= & -\ln Z_{\sigma'}(\beta), \tag{C.1.4}
\end{aligned}$$

puisque le premier et le troisième terme sont égaux et grâce à la définition de $Z_{\sigma'}(\beta)$ donnée par la formule (4.1.7).

De manière similaire, on calcule pour les densités de probabilité a priori concernant des erreurs ε :

$$\sum_{\varepsilon} q(\varepsilon) \ln \left[\frac{q(\varepsilon)}{\zeta(\varepsilon)} \right] - \beta^T \left(\sum_{\varepsilon} q(\varepsilon) \mathbf{H} \varepsilon \right) = -\ln Z_{\varepsilon'}(\beta).$$

C.2 Estimateurs de la source pour différentes ébauches

C.2.1 Source délocalisée

La source a priori délocalisée se traduit mathématiquement par l'indépendance des mailles entre elles. Nous avons vu dans la partie principale de cette thèse que la fonction de partition s'exprime à l'aide des équations (4.1.15 - 4.1.17). On rappelle ici sa forme :

$$Z_{\sigma}(\beta) = \prod_{k=1}^N Z_k(\beta) = \prod_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] . \quad (\text{C.2.1})$$

Notons que l'indice $k = l \cdot N_t + n$ avec $l \in \{1, \dots, N_s\}$ et $n \in \{1, \dots, N_t\}$. En reportant cette formule dans le densité de probabilité a posteriori (4.1.8) nous pouvons exprimer l'estimateur de la source, (4.1.12), dans la k_0 -ème maille selon :

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_{k_0} &= P_{k_0} \sum_{\sigma} \sigma p(\sigma) = P_{k_0} \sum_{\sigma} \sigma \frac{\nu(\sigma) \exp(\beta^T \mathbf{H} \sigma)}{Z_{\sigma'}(\beta)} \\ &= \frac{1}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \sum_{\sigma_{k_0}} \sigma_{k_0} \cdot \prod_{k=1}^N \nu(\sigma_k) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_k \sigma_k) \\ &= \frac{1}{Z_{\sigma'}(\beta)} \cdot \sum_{\sigma_{k_0}} \sigma_{k_0} \cdot \nu(\sigma_{k_0}) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_{k_0} \sigma_{k_0}) \cdot \prod_{k=1, k \neq k_0}^N \nu(\sigma_k) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_k \sigma_k) \\ &= \frac{\prod_{k=1, k \neq k_0}^N \nu(\sigma_k) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_k \sigma_k)}{Z_{\sigma_{k_0}}(\beta)} \cdot \sum_{\sigma_{k_0}} \sigma_{k_0} \cdot \nu(\sigma_{k_0}) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_{k_0} \sigma_{k_0}) \\ &= \frac{1}{Z_{\sigma_{k_0}}(\beta)} \cdot \sum_{\sigma_{k_0}} \sigma_{k_0} \cdot \nu(\sigma_{k_0}) \exp([\beta^T \mathbf{H}]_{k_0} \sigma_{k_0}) \\ &= \frac{0 \cdot (1 - \gamma_{k_0}) \cdot \exp(0 \cdot [\beta^T \mathbf{H}]_{k_0}) + m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_{k_0})}{(1 - \gamma_{k_0}) \cdot \exp(0 \cdot [\beta^T \mathbf{H}]_{k_0}) + \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_{k_0})} \\ &= \boxed{\frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_{k_0})}{1 - \gamma_{k_0} + \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_{k_0})}} , \quad \forall k_0 \in \{1, \dots, N\} , \quad (\text{C.2.2}) \end{aligned}$$

où σ_{k_0} , σ_k sont des composantes de σ dans la k_0 -ème, k -ème maille respectivement.

C.2.2 Source localisée

Le deuxième type d'information a priori considéré est celui que pré-suppose une source localisée qui impose donc une corrélation entre les mailles spatiales. On rappelle que la fonction de partition obtenue sous cette hypothèse s'écrit :

$$Z_{\sigma}(\beta) = \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\beta^T \mathbf{H}]_k)] .$$

En la reportant dans l'estimateur de la source, et se souvenant que $k_0 = (l_0 - 1) \cdot N_t + n_0$ et $k = (l_0 - 1) \cdot N_t + n$, nous avons :

$$\begin{aligned}
\bar{\sigma}_{k_0} &= P_{k_0} \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\sigma} p(\boldsymbol{\sigma}) = P_{k_0} \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\sigma} \frac{\nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \\
&= \frac{1}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \cdot P_{k_0} \sum_{\boldsymbol{\sigma}_k} \boldsymbol{\sigma}_k \cdot \nu(\boldsymbol{\sigma}_k) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}_k) \\
&= \frac{1}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \cdot \sum_{\boldsymbol{\sigma}_{k_0}} \boldsymbol{\sigma}_{k_0} \cdot \prod_{n=1}^{N_t} \nu(\boldsymbol{\sigma}_k) \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k \boldsymbol{\sigma}_k) \\
&= \frac{1}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \cdot \sum_{\boldsymbol{\sigma}_{k_0}} \boldsymbol{\sigma}_{k_0} \cdot \nu(\boldsymbol{\sigma}_{k_0}) \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0} \boldsymbol{\sigma}_{k_0}) \cdot \prod_{n=1, n \neq n_0}^{N_t} \nu(\boldsymbol{\sigma}_k) \exp([\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k \boldsymbol{\sigma}_k) \\
&= \frac{\prod_{n=1, n \neq n_0}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)]}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \cdot [0 + m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})] \\
&= \boxed{\frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}{1 - \gamma_{k_0} + \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})} \cdot \frac{\prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)]}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})}}, \tag{C.2.3}
\end{aligned}$$

ce qui est l'expression de la formule (4.1.24).

C.2.3 Source localisée et instantanée

Pour la troisième source a priori, localisée et instantanée, qui impose la corrélation de toutes les mailles et pour laquelle la fonction de partition s'écrit :

$$Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)],$$

nous écrivons l'estimateur de la source dans la k_0 -ème maille comme :

$$\begin{aligned}
\bar{\sigma}_{k_0} &= \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\sigma} p(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \boldsymbol{\sigma} \frac{\nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma})}{Z_{\boldsymbol{\sigma}'}(\boldsymbol{\beta})} \\
&= \boxed{\frac{m \cdot \gamma_{k_0} \cdot \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_{k_0})}{\sum_{k=1}^N [1 - \gamma_k + \gamma_k \exp(m[\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H}]_k)]}}. \tag{C.2.4}
\end{aligned}$$

C.3 Lien entre maximum d'entropie et 4D-Var pour un système linéaire

C.3.1 Source

Nous considérons la loi gaussienne donnée par :

$$\nu(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma}\right).$$

En la reportant dans la fonction de partition donnée par l'équation (4.1.7) nous obtenons :

$$\begin{aligned} Z_{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \nu(\boldsymbol{\sigma}) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \int_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{E}_\nu} \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma}\right) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \int_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{E}_\nu} \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma} - 2 \cdot \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}]\right) \\ &= \exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right) \\ &\quad \cdot \int_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{E}_\nu} \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right)^T \left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right)\right] \\ &= \exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right), \end{aligned} \tag{C.3.1}$$

puisque

$$\begin{aligned} &\left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right)^T \left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right) \\ &= \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\sigma} - 2 \cdot \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \mathbf{B} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}. \end{aligned}$$

Le dernier passage étant possible parce qu'il s'agit d'un nombre réel donc $\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma} = [\boldsymbol{\sigma}^T \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}]^T$. Nous avons utilisé également la symétrie des matrices de covariance d'erreur : $\mathbf{B} = \mathbf{B}^T$ et $\mathbf{R} = \mathbf{R}^T$. Pour remarquer que la dernière égalité est vraie il suffit d'effectuer le changement des variables $\mathbf{x} = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}$ et donc $d\mathbf{x} = \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{(\det \mathbf{B})^{\frac{1}{2}}}$.

Par conséquent :

$$\begin{aligned} &\int_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{E}_\nu} \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{(2\pi)^N \det \mathbf{B}}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right)^T \left(\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{B}^{\frac{1}{2}} \mathbf{H}^T \boldsymbol{\beta}\right)\right] \\ &= \int_{\mathbf{x} \in \mathcal{E}'_\nu} \frac{d\mathbf{x}}{\sqrt{(2\pi)^N}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T \mathbf{x}\right] = 1, \end{aligned}$$

parce que $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$.

Erreurs

De manière analogue nous avons pour des erreurs gaussiennes une fonction de partition de la forme :

$$\begin{aligned}
Z_{\varepsilon}(\boldsymbol{\beta}) &= \sum_{\varepsilon} \zeta(\varepsilon) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \varepsilon) = \int_{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{(2\pi)^d \det \mathbf{R}}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \varepsilon^T \mathbf{R}^{-1} \varepsilon\right) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \varepsilon) \\
&= \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}\right) \cdot \int_{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{(2\pi)^d \det \mathbf{R}}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon - \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\beta}\right)^T \left(\mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon - \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\beta}\right)\right] \\
&= \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}\right). \tag{C.3.2}
\end{aligned}$$

Estimateur d'erreurs pour la loi Gaussienne

Il s'agit de calculer :

$$\begin{aligned}
\bar{\varepsilon} &= \sum_{\varepsilon} q(\varepsilon) \varepsilon = \sum_{\varepsilon} \varepsilon \frac{\zeta(\varepsilon) \exp(\boldsymbol{\beta}^T \varepsilon)}{Z_{\varepsilon}(\boldsymbol{\beta})} \\
&= \int_{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \varepsilon \cdot \frac{\exp(-\frac{1}{2} \varepsilon^T \mathbf{R}^{-1} \varepsilon) \cdot \exp(\boldsymbol{\beta}^T \varepsilon)}{\exp(\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{R} \boldsymbol{\beta})} \\
&= \int_{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \varepsilon \cdot \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon - \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\beta}\right)^T \left(\mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon - \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\beta}\right)\right].
\end{aligned}$$

En faisant le changement des variables : $\mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \varepsilon - \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{R}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\eta}$, ce qui implique $\varepsilon = \boldsymbol{\eta} + \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}$, l'estimateur $\bar{\varepsilon}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\bar{\varepsilon} &= \int \frac{d\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot [\boldsymbol{\eta} + \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\eta}\right) \\
&= \int \frac{d\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\eta}\right) \\
&\quad + \int \frac{d\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \mathbf{R} \boldsymbol{\beta} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\eta}\right) \\
&= 0 + \mathbf{R} \boldsymbol{\beta} \int_{\boldsymbol{\eta}} \frac{d\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\eta}\right) \\
&= \mathbf{R} \boldsymbol{\beta}. \tag{C.3.3}
\end{aligned}$$

L'égalité ci-dessus provient du fait :

$$\int_{\boldsymbol{\eta}} \frac{d\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{(2\pi)^p \det \mathbf{R}}} \cdot \boldsymbol{\eta} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\eta}\right) = 0,$$

comme l'intégrale d'une fonction impaire sur un domaine symétrique par rapport à l'origine.

C.4 Entropie relative d'une vraie source

Nous présentons ici des calculs qui permettent de définir un problème d'optimisation qui partage sa formulation duale avec le problème de minimisation de l'information de Kullback-Leibler.

C.4.1 Fonctionnelle délocalisée

La transformée log de Laplace de la densité de probabilité a priori $\nu(\boldsymbol{\sigma})$ décrivant une source délocalisée s'exprime :

$$\widehat{\nu}(\boldsymbol{\alpha}) = \ln \left\{ \prod_{k=1}^N \nu(\sigma_k) \exp(\sigma_k \alpha_k) \right\}.$$

Si $\nu(\sigma_k)$ associé à k -ième maille s'écrit selon la loi de Bernoulli (m, γ) , alors la transformée de Legendre-Fenchel, (4.1.40), prend la forme :

$$\begin{aligned} \widehat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma}) &= \max_{\boldsymbol{\alpha}} (\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \widehat{\nu}(\boldsymbol{\alpha})) \\ &= \max_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \sum_{k=1}^N \ln [1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)] \right), \end{aligned} \quad (\text{C.4.1})$$

où nous nous sommes restreints aux termes décrivant la source.

Pour retrouver le maximum de cette expression, il faut calculer sa dérivée par rapport à chacune composante du vecteur $\boldsymbol{\alpha}$ et l'imposer égale à zéro. Remarquons qu'à cause de la concavité de la fonctionnelle cette condition suffit pour retrouver le maximum. Nous imposons donc :

$$\frac{\partial \widehat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \alpha_k} = \sigma_k - \frac{\gamma m \exp(m\alpha_k)}{1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)} = 0,$$

ce qui implique :

$$\sigma_k(1 - \gamma) + (\sigma_k - m)\gamma \exp(m\alpha_k) = 0,$$

et donc :

$$\alpha_k = \frac{1}{m} \ln \left[\frac{1 - \gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{m - \sigma_k} \right], \quad \forall k \in 1, \dots, N.$$

Par conséquent la fonctionnelle $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) = \hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma})$ s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) &= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \left[\frac{1-\gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{m-\sigma_k} \right] - \sum_{k=1}^N \ln \left[1-\gamma + \gamma \exp \left(\ln \left[\frac{1-\gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{m-\sigma_k} \right] \right) \right] \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \left[\frac{\frac{\sigma_k}{m}}{1-\frac{\sigma_k}{m}} \right] - \sum_{k=1}^N \ln \left[(1-\gamma) \cdot \left(1 + \frac{\frac{\sigma_k}{m}}{1-\frac{\sigma_k}{m}} \right) \right] \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} + \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) \\
&\quad - \sum_{k=1}^N \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) - \sum_{k=1}^N \ln (1-\gamma) - \sum_{k=1}^N \ln \left(1 + \frac{\frac{\sigma_k}{m}}{1-\frac{\sigma_k}{m}} \right) \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} + \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) \\
&\quad - N \ln (1-\gamma).
\end{aligned} \tag{C.4.2}$$

La dernière égalité étant obtenu tout simplement grâce à :

$$-\sum_{k=1}^N \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} \right) - \sum_{k=1}^N \ln \left(1 + \frac{\frac{\sigma_k}{m}}{1-\frac{\sigma_k}{m}} \right) = -\sum_{k=1}^N \ln \left(1 - \frac{\sigma_k}{m} + \frac{\sigma_k}{m} \right) = -\sum_{k=1}^N \ln 1 = 0.$$

S'il s'agit de calculer $\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma})$ pour une source localisée et instantanée qui est donc confinée à une seule maille, la formule se réduit à :

$$\mathcal{J}(\sigma) = \frac{\sigma}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma}{m} \ln \frac{\sigma}{m} + \left(1 - \frac{\sigma}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma}{m} \right) - N \ln (1-\gamma). \tag{C.4.3}$$

C.4.2 Fonctionnelle localisée

Prenons maintenant une transformée log de Laplace de la densité de probabilité a priori décrivant une source localisée :

$$\hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha}) = \ln \left\{ \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m\alpha_k)] \right\},$$

où nous rappelons que l'indice k est une combinaison $k = l \cdot N_t + n$. La transformée de Legendre-Fenchel de $\hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha})$ est donnée par :

$$\begin{aligned}
\hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma}) &= \max_{\boldsymbol{\alpha}} (\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha})) \\
&= \max_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \ln \left\{ \sum_{l=1}^{N_s} \frac{1}{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma_k + \gamma_k \cdot \exp(m\alpha_k)] \right\} \right), \tag{C.4.4}
\end{aligned}$$

et en la dérivant on obtient :

$$\frac{\partial \hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \alpha_{k_0}} = \sigma_{k_0} - \frac{\frac{1}{N_s} \cdot m \gamma \exp(m\alpha_{k_0}) \cdot \prod_{n=1, n \neq k_0}^{N_t} [1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)]}{\frac{1}{N_s} \sum_{l=1}^{N_s} \prod_{n=1}^{N_t} [1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)]} = 0. \tag{C.4.5}$$

L'ensemble des équations pour $k_0 \in \{1, \dots, N\}$ est impossible à résoudre dans le cas général. Remarquons néanmoins que pour une source qui est localisée et instantanée (confinée à la maille k_0) le système (C.4.5) se réduit à une seule équation :

$$\sigma_{k_0} - \frac{(1-\gamma)^{N_t-1} m \gamma \exp(m\alpha_{k_0})}{(N_s-1)(1-\gamma)^{N_t} + (1-\gamma)^{N_t-1}(1-\gamma + \gamma \exp(m\alpha_{k_0}))} = 0,$$

qui devient :

$$\begin{aligned} & \sigma_{k_0}(N_s-1)(1-\gamma)^{N_t} + (1-\gamma)^{N_t-1} \sigma_{k_0}(1-\gamma + \gamma \exp(m\alpha_{k_0})) \\ & - (1-\gamma)^{N_t-1} m \gamma \exp(m\alpha_{k_0}) = 0, \end{aligned}$$

et qui s'écrit ensuite :

$$\sigma_{k_0}(N_s-1)(1-\gamma) + \sigma_{k_0}(1-\gamma) + \sigma_{k_0} \gamma \exp(m\alpha_{k_0}) - m \gamma \exp(m\alpha_{k_0}) = 0.$$

Elle donne :

$$\sigma_{k_0} N_s (1-\gamma) + (\sigma_{k_0} - m) \gamma \exp(m\alpha_{k_0}),$$

et donc :

$$\exp(m\alpha_{k_0}) = N_s \cdot \frac{1-\gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_{k_0}}{m - \sigma_{k_0}},$$

qui permet d'obtenir :

$$\alpha_{k_0} = \frac{1}{m} \ln \left[N_s \cdot \frac{1-\gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_{k_0}}{m - \sigma_{k_0}} \right].$$

Par conséquent $\mathcal{J}(\sigma_{k_0})$ s'exprime :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\sigma_{k_0}) &= \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \left[N_s \cdot \frac{1-\gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_{k_0}}{m - \sigma_{k_0}} \right] \\ &\quad - \ln \left[\frac{N_s-1}{N_s} \cdot (1-\gamma)^{N_t} + \frac{1}{N_s} (1-\gamma)^{N_t-1} \left(1-\gamma + N_s(1-\gamma) \cdot \frac{\sigma_{k_0}}{m - \sigma_{k_0}} \right) \right] \\ &= \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln N_s + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{\sigma_{k_0}}{m} + \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \\ &\quad - \ln \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) - \ln \left[\frac{(1-\gamma)^{N_t}}{N_s} \cdot \left(N_s - 1 + 1 + N_s \cdot \frac{\frac{\sigma_{k_0}}{m}}{1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m}} \right) \right] \\ &= \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln N_s + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{\sigma_{k_0}}{m} + \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \\ &\quad - \ln \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) - N_t \ln(1-\gamma) - \ln \left(1 + \frac{\frac{\sigma_{k_0}}{m}}{1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m}} \right) \\ &= \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln N_s + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma_{k_0}}{m} \ln \frac{\sigma_{k_0}}{m} + \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma_{k_0}}{m} \right) \\ &\quad - N_t \ln(1-\gamma). \end{aligned} \tag{C.4.6}$$

C.4.3 Fonctionnelle localisée et instantanée

La transformée log de Laplace pour une source décrite par la densité de probabilité a priori $\nu(\boldsymbol{\sigma})$ incarnant une source confinée spatialement et temporellement s'exprime :

$$\hat{\nu}(\boldsymbol{\alpha}) = \ln \left\{ \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \nu(\sigma_k) \exp(\sigma_k \alpha_k) \right\}.$$

Si dans chacune cellule du maillage elle s'écrit selon la loi de Bernoulli (m, γ) , alors la transformée de Legendre-Fenchel, formule 4.1.40, qui prend la forme :

$$\hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma}) = \max_{\boldsymbol{\alpha}} \left(\boldsymbol{\sigma}^T \boldsymbol{\alpha} - \ln \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)] \right). \quad (\text{C.4.7})$$

De la manière analogue aux cas précédents, nous calculons la dérivée et imposons la condition qu'elle soit nulle :

$$\frac{\partial \hat{\nu}^*(\boldsymbol{\sigma})}{\partial \alpha_{k'}} = \sigma_{k'} - \frac{\frac{1}{N} \gamma m \exp(m\alpha_{k'})}{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - \gamma + \gamma \exp(m\alpha_k)]} = 0. \quad (\text{C.4.8})$$

En sommant l'expression ci-dessus sur $k' \in \{1, \dots, N\}$ nous obtenons :

$$\sum_{k'=1}^N \sigma_{k'} - \frac{m \sum_{k'} \gamma \exp(m\alpha_{k'})}{\sum_k (1 - \gamma) + \sum_k \gamma \exp(m\alpha_k)} = 0, \quad (\text{C.4.9})$$

ce qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned} N(1 - \gamma) \cdot \sum_{k'=1}^N \sigma_{k'} + \sum_{k'=1}^N \sigma_{k'} \cdot \sum_{k=1}^N \gamma \exp(m\alpha_k) - m \sum_{k'=1}^N \gamma \exp(m\alpha_{k'}) &= 0, \\ N(1 - \gamma) \cdot \sum_{k'=1}^N \sigma_{k'} + \left(\sum_{k'=1}^N \sigma_{k'} - m \right) \cdot \sum_{k=1}^N \gamma \exp(m\alpha_k) &= 0, \\ \boxed{\sum_{k=1}^N \gamma \exp(m\alpha_k) = N(1 - \gamma) \cdot \frac{\sum_{k'} \sigma_{k'}}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}}}. & \quad (\text{C.4.10}) \end{aligned}$$

En reportant cette expression dans l'équation (C.4.8) nous avons par ailleurs :

$$\begin{aligned} \sigma_k - \frac{\gamma m \exp(m\alpha_k)}{N(1 - \gamma) + N(1 - \gamma) \cdot \left(\frac{\sum_{k'} \sigma_{k'}}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right)} &= 0, \\ N(1 - \gamma) \sigma_k + N(1 - \gamma) \sigma_k \cdot \left(\frac{\sum_{k'} \sigma_{k'}}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right) - \gamma m \exp(m\alpha_k) &= 0, \\ N(1 - \gamma) \sigma_k \cdot \left(\frac{m}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right) - \gamma m \exp(m\alpha_k) &= 0, \\ N \cdot \frac{1 - \gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} &= \exp(m\alpha_k) \\ \boxed{\alpha_k = \frac{1}{m} \ln \left[N \cdot \frac{1 - \gamma}{\gamma} \cdot \frac{\sigma_k}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right]}. & \quad (\text{C.4.11}) \end{aligned}$$

Par conséquent, en utilisant les expressions (C.4.10) et (C.4.11) nous aboutissons à :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) &= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \left[N \cdot \frac{1-\gamma_k}{\gamma_k} \cdot \frac{\sigma_k}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right] - \ln \left[(1-\gamma) + (1-\gamma) \cdot \frac{\sum_{k'} \sigma_{k'}}{m - \sum_{k'} \sigma_{k'}} \right] \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln N + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \left[\frac{\frac{\sigma_k}{m}}{1 - \sum_{k'} \frac{\sigma_{k'}}{m}} \right] - \ln(1-\gamma) \\
&\quad - \ln \left[1 + \frac{\sum_{k'} \frac{\sigma_{k'}}{m}}{1 - \sum_{k'} \frac{\sigma_{k'}}{m}} \right] \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln N + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} \\
&\quad + \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \right) \ln \left(1 - \sum_{k'=1}^N \frac{\sigma_{k'}}{m} \right) \\
&\quad - \ln \left(1 - \sum_{k'=1}^N \frac{\sigma_{k'}}{m} \right) - \ln(1-\gamma) - \ln \left(\frac{1}{1 - \sum_{k'} \frac{\sigma_{k'}}{m}} \right) \\
&= \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln N + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \ln \frac{\sigma_k}{m} \\
&\quad + \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \right) \ln \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{\sigma_k}{m} \right) - \ln(1-\gamma). \tag{C.4.12}
\end{aligned}$$

Si la source $\boldsymbol{\sigma}$ est localisée et instantanée, c'est-à-dire confinée à une seule maille, alors nous avons :

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sigma}{m} \ln N + \frac{\sigma}{m} \ln \frac{1-\gamma}{\gamma} + \frac{\sigma}{m} \ln \frac{\sigma}{m} + \left(1 - \frac{\sigma}{m} \right) \ln \left(1 - \frac{\sigma}{m} \right) - \ln(1-\gamma). \tag{C.4.13}$$

C.5 Calcul pour la formulation adjointe continue

Pour le problème continu décrit dans la section 4.2.1 il s'agit de présenter ici des opérations de l'intégration par parties. Les calculs sont faits pour chaque terme séparément.

- Commençons par le premier terme de l'équation (4.2.3) :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \frac{\partial}{\partial t}(c\phi) = \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \frac{\partial c}{\partial t} \phi + \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (\text{C.5.1})$$

Puisque, par ailleurs :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \frac{\partial}{\partial t}(c\phi) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} [c(\mathbf{x}, \tau)\phi(\mathbf{x}, \tau) - c(\mathbf{x}, 0)\phi(\mathbf{x}, 0)] = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} [c(\mathbf{x}, \tau)\phi(\mathbf{x}, \tau)] \quad (\text{C.5.2})$$

à cause des conditions initiales 2.1.3, nous avons au final :

$$\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \frac{\partial c}{\partial t} \phi = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} [c(\mathbf{x}, \tau)\phi(\mathbf{x}, \tau)] - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \frac{\partial \phi}{\partial t}. \quad (\text{C.5.3})$$

- Le second terme s'intègre d'une manière analogue. Écrivons d'abord, en omettant le signe d'une somme sur i qui parcourt les trois dimensions spatiales :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\phi c \mathbf{u}) &= \partial_i(\phi c \mathbf{u})^i = c \partial_i(\phi \mathbf{u})^i + (\partial_i c)(\phi \mathbf{u})^i = c \partial_i(\phi \mathbf{u})^i + \phi (\partial_i c)(\mathbf{u})^i \\ &= c \partial_i(\phi \mathbf{u})^i + \phi (\partial_i c \mathbf{u}^i) - \phi c \partial_i \mathbf{u}^i \\ &= c \operatorname{div}(\phi \mathbf{u}) + \phi \operatorname{div}(c \mathbf{u}) - 0, \quad \text{sous l'hypothèse } \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0. \end{aligned} \quad (\text{C.5.4})$$

Nous pouvons donc exprimer l'intégrale :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi \operatorname{div}(c \mathbf{u}) &= \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \operatorname{div}(\phi c \mathbf{u}) - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\phi \mathbf{u}) \\ &= \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} (\phi c \mathbf{u}) - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\phi \mathbf{u}). \end{aligned} \quad (\text{C.5.5})$$

- Pour obtenir la contribution provenant du troisième terme, nous allons d'abord fait de calcul sur des vecteurs qui se trouvent sous le signe de l'intégrale. En effet nous écrivons :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\phi \mathbf{K} \nabla c) &= \operatorname{div}(\mathbf{K} \phi \nabla c) \quad \phi \text{ étant scalaire} \\ &= \partial_i(\mathbf{K} \phi \nabla c)^i \quad \text{en omettant le signe de somme sur } i \\ &= \partial_i(\mathbf{K} \nabla(\phi c) - \mathbf{K} c \nabla \phi)^i \quad \text{puisque } \nabla(\phi c) = \phi \nabla c + c \nabla \phi \\ &= \partial_i(\mathbf{K} c \nabla \phi + \mathbf{K} \phi \nabla c - \mathbf{K} c \nabla \phi)^i \quad \text{de même} \\ &= \partial_i(\mathbf{K} c \nabla \phi)^i \\ &+ (\partial \phi)_i (\mathbf{K} \nabla c)^i + \phi \partial_i (\mathbf{K} \nabla c)^i \\ &- (\partial c)_i (\mathbf{K} \nabla \phi)^i - c \partial_i (\mathbf{K} \nabla \phi)^i \\ &= \operatorname{div}(\mathbf{K} c \nabla \phi) + \phi \operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla c) - c \operatorname{div}(\mathbf{K} \nabla \phi). \end{aligned}$$

La dernière égalité a pu être écrite grâce à $(\partial\phi)_i(\mathbf{K}\nabla c)^i = (\partial c)_i(\mathbf{K}\nabla\phi)^i$. Par conséquent nous exprimons :

$$\phi \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) = \operatorname{div}(\phi\mathbf{K}\nabla c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}c\nabla\phi) + c \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\phi). \quad (\text{C.5.6})$$

Maintenant nous sommes capables de remplacer l'intégrale :

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) &= - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \operatorname{div}(\phi\mathbf{K}\nabla c) + \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \operatorname{div}(\mathbf{K}c\nabla\phi) \\ &\quad - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\phi) \\ &= - \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\phi\mathbf{K}\nabla c) + \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\mathbf{K}c\nabla\phi) \\ &\quad - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\phi) \end{aligned} \quad (\text{C.5.7})$$

– Le quatrième et le cinquième termes restent inchangés.

Nous retrouvons donc suite à ces opérations :

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla c) - \lambda c - \sigma \right) \\ &= - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \frac{\partial \phi}{\partial t} + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} [c(\mathbf{x}, \tau)\phi(\mathbf{x}, \tau)] \\ &\quad - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\mathbf{u}\phi) + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} (\phi c\mathbf{u}) \\ &\quad - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\phi) - \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\phi\mathbf{K}\nabla c) + \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\mathbf{K}c\nabla\phi) \\ &\quad - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c\lambda\phi - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi\sigma \\ &= - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} c \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\phi) + \operatorname{div}(\mathbf{K}\nabla\phi) + \lambda\phi \right) - \int_{\Omega} dt d\mathbf{x} \phi\sigma \\ &\quad + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} [c(\mathbf{x}, \tau)\phi(\mathbf{x}, \tau)] + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} (\phi c\mathbf{u}) \\ &\quad - \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\phi\mathbf{K}\nabla c) + \int_{\partial\mathcal{D}\times[0,\tau]} dt d\mathbf{S} (\mathbf{K}c\nabla\phi), \end{aligned} \quad (\text{C.5.8})$$

ce qui est précisément l'équation (4.2.4 - 4.2.7).

C.6 Calcul pour l'équation adjointe dans le cas discret

Nous partons de l'équation (4.2.15) et nous analysons chacun des quatre termes. Premièrement,

$$\sum_{n=1}^{N_t} \langle \phi_n, \mathbf{c}_{n+1} \rangle = \sum_{n'=2}^{N_t+1} \langle \phi_{n'-1}, \mathbf{c}_{n'} \rangle = \sum_{n'=2}^{N_t} \langle \phi_{n'-1}, \mathbf{c}_{n'} \rangle = \sum_{n=1}^{N_t+1} \langle \phi_{n-1}, \mathbf{c}_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_t+1} \langle \mathbf{c}_n, \phi_{n-1} \rangle$$

parce que $\phi_{N_t+1} = 0$ et parce que $\mathbf{c}_1 = 0$. Deuxièmement,

$$\sum_{n=1}^{N_t} \langle \phi_n, \mathbf{c}_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_t} \langle \mathbf{c}_n, \phi_n \rangle,$$

à cause de la symétrie du produit scalaire. Et de même pour le quatrième terme :

$$\sum_{n=1}^{N_t} \Delta t \langle \phi_n, \boldsymbol{\sigma}_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_t} \Delta t \langle \boldsymbol{\sigma}_n, \phi_n \rangle.$$

Finalement, le troisième terme s'écrit :

$$\sum_{n=1}^{N_t} \Delta t \langle \phi_n, \mathbf{A}_n \cdot \mathbf{c}_n \rangle = \sum_{n=1}^{N_t} \Delta t \langle \mathbf{A}_n^T \cdot \phi_n, \mathbf{c}_n \rangle.$$

Nous avons par conséquent remplacé l'équation (4.2.15) par :

$$\sum_{k,n} \langle \mathbf{c}_n, \phi_{n-1} - \phi_n - \Delta t \mathbf{A}_n^T \cdot \phi_n \rangle = \sum_{k,n} \Delta t \langle \phi_n, \boldsymbol{\sigma}_n \rangle, \quad (\text{C.6.1})$$

ce qui est la forme recherchée, (4.2.16).

Annexe D

Liste des sigles utilisés

- AIEA = Agence internationale de l'énergie atomique (agence spécialisée de l'ONU)
(IAEA = International Atomic Energy Agency)
<http://www.iaea.org/>
- AEN = Agence pour l'énergie nucléaire
<http://www.nea.fr/>
- ATMES = Atmospheric Transport Model Evaluation Study
<http://rem.jrc.cec.eu.int/atmes2.html>
- BFGS = Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno Algorithm
L-BFGS-B = limited-memory quasi-Newton code for large-scale bound-constrained or unconstrained optimisation
<http://www.ece.northwestern.edu/nocedal/lbfgsb.html>
- CEREIA = Centre d'enseignement et de recherche en environnement atmosphérique
<http://www.enpc.fr/cereia/fr/>
- CTBT = Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty
<http://www.ctbto.org/>
- DAONEM = Data Assimilation for Off site Nuclear Emergency Management
- DMI = Danmarks Meteorologiske Institut
<http://www.dmi.dk/eng/index/forecasts.htm>
- ECL = École centrale de Lyon
<http://www.ec-lyon.fr/>
- ERA-40 = Champs météorologiques d'ECMWF réanalysés sur 45 ans
<http://www.ecmwf.int/research/era/>
- ECMWF = European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
<http://www.ecmwf.int/>
- EMEP = European Monitoring and Evaluation Program (Co-operative Programme for Monitoring and Evaluation of the Long-range Transmission of Air pollutants in Europe)
<http://www.emep.int/>
- ETEX = European Tracer EXperiment
<http://rem.jrc.cec.eu.int/etex/index.html>

- HIRLAM= HIgh Resolution Limited Area Model
<http://hirlam.org/>
- ICRP = International Commission on Radiological Protection
<http://www.icrp.org/>
- IMS = International Monitoring System
- INES = International Nuclear Event Scale
<http://www.iaea.org/Publications/Factsheets/English/ines-e.pdf>
- INRIA = Institut national de recherche en informatique et en automatique
<http://www.inria.fr/>
- IRSN = Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire
<http://www.irsn.org/>
- LLNL = Lawrence Livermore National Laboratory
<http://www.llnl.gov/>
- MMx = PSU/NCAR (Penn State/National Center for Atmospheric Research) mesoscale model, version x
<http://www.mmm.ucar.edu/mm5/mm5-home.html>
- NATO = North Atlantic Treaty Organisation
<http://www.nato.int/>
- OCDE = Organisation de coopération et de développement économiques
<http://www.oecd.org/home/>
- OMM = Organisation météorologique mondiale (institution spécialisée de l'ONU) (WMO = World Meteorological Organisation)
<http://www.wmo.ch/index-fr.html>
- OSSE = Observing System Simulation Experiments
- PSAS = Physical Space Assimilation System
- RBMK = “Reaktor Bolshoy Moshchnosti Kanalniy” ce qui veut dire “réacteur (de la) grande puissance (du type) canal”
- REM = Radioactivity Environmental Monitoring
<http://ies.jrc.cec.eu.int/rem.html>
- RODOS = Realtime Online Decision Support System for Nuclear Emergency Management
<http://www.rodos.fzk.de/>
- RTMOD = Real-Time MODel Evaluation
- SMHI = Swedish Meteorological and Hydrological Institute
<http://www.smhi.se/>
- UTC = Coordinated Universal Time
- VVER = “Voda-Vodianoï Energeticheskiy Reaktor” ce qui veut dire “réacteur énergétique (du type) eau-eau”

Modèles de dispersion

- CTM = Chemistry-Transport-Model (modèle de chimie-transport)
- EURAD = EURopean Acid Deposition model

-
- DREAM = Danish Rimpuff and Eulerian Accidental release Model
 - DERMA = Danish Emergency Response Model for Atmosphere
 - MATCH = Multiscale Atmospheric Transport and Chemistry model
 - NAME = Nuclear Accident Model
 - RIMPUFF=Risø Mesoscale PUFF model

Indicateurs statistiques

- B = Bias (biais)
- BLUE = Best Linear Unbiased Estimator (meilleur estimateur linéaire sans biais)
- FB = Fractional Bias (biais fractionnel)
- FM = Figure of Merit (indice de mérite)
- FSD = Fractional Standard Deviation (écart-type fractionnel)
- NMSE = Normalised Mean Square Error (erreur moyenne quadratique normalisée)
- MG = Geometric Mean Bias (biais géométrique moyen)
- RMSE = Root Mean Square Error (écart quadratique moyen)
- VG = Geometric Mean Variance (variance géométrique moyenne)

Bibliographie

- [Abbey et Schikarski, 1988] ABBEY, F. et SCHIKARSKI, W. (1988). Aerosol behaviour and light water reactor source terms. *Nuclear Safety*, 81:293–306.
- [ApSimon et Wilson, 1986] APSIMON, H. et WILSON, J. (1986). Tracking the cloud from Chernobyl. *New Scientist*, 17:42–45.
- [ApSimon *et al.*, 1989] APSIMON, H., WILSON, J. et SIMMS, K. (1989). Analysis of the dispersal and deposition of radionuclides from Chernobyl across Europe. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 425:365–405.
- [Arya, 1999] ARYA, S. P. (1999). *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press.
- [*Atmospheric Environment*, 1998] *Atmospheric Environment* (1998). Édition speciale. (32(24)):4089–4375.
- [Baklanov, 1999] BAKLANOV, A. (1999). Parameterisation of the deposition processes and radioactive decay : A review and some preliminary results with the DERMA model. Rapport technique 99-4, DMI, Danemark.
- [Baklanov et Mahura, 2004] BAKLANOV, A. et MAHURA, A. (2004). Assessment of possible airborne impact from risk sites : methodology for probabilistic atmospheric studies. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4:485–495.
- [Baklanov *et al.*, 2002] BAKLANOV, A., MAHURA, A., SØRENSEN, J. H., RIGINA, O. et BERGMAN, R. (2002). Methodology for risk analysis based on atmospheric dispersion modelling from nuclear risk sites. Rapport technique 02-16, DMI, Danemark.
- [Belot *et al.*, 1988] BELOT, Y., CAPUT, C. et GUENOT, J. (1988). Étude bibliographique du lavage par la pluie des radionucléides particuliers et gazeux émis en situation accidentelle. Rapport technique, IRSN et EDF, France.
- [Bocquet, 2005a] BOCQUET, M. (2005a). Grid resolution dependence in the reconstruction of an atmospheric tracer source. *Nonlinear Proc. in Geophys.*, 12:219–234.
- [Bocquet, 2005b] BOCQUET, M. (2005b). Introduction aux principes et méthodes de l’assimilation de données en géophysique. Notes de cours de l’École Nationale Supérieure des Techniques Avancées. Révision 1.03. Rapport technique 60, CEREAs.
- [Bocquet, 2005c] BOCQUET, M. (2005c). Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. I : Theory. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, 131:2191–2208.
- [Bocquet, 2005d] BOCQUET, M. (2005d). Reconstruction of an atmospheric tracer source using the principle of maximum entropy. II : Applications. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, 131:2209–2224.
- [Bocquet, 2006] BOCQUET, M. (2006). High resolution reconstruction of a tracer dispersion event : application to ETEX. Soumis à *Q.J.R.Meteorol.Soc.*

- [Bocquet et Krysta, 2005] BOCQUET, M. et KRISTA, M. (2005). Inverse modelling of passive atmospheric tracers using entropy-based methods : Methodological aspects. In LE DIMET, F.-X. et SPORTISSE, B., éditeurs : *Proceedings of the Workshop CEA-EDF-INRIA : data assimilation and inverse modeling in geosciences*.
- [Bousquet *et al.*, 2000] BOUSQUET, P., PEYLIN, P., CIAIS, P., QUÉRÉ, C. L., FRIEDLINGSTEIN, P. et TANS, P. (2000). Regional changes in carbon dioxide fluxes of land and oceans since 1980. *Science*, 290:1342–1345.
- [Boutahar *et al.*, 2004] BOUTAHAR, J., LACOUR, S., MALLET, V., MUSSON-GENON, L., QUÉLO, D., ROUSTAN, Y. et SPORTISSE, B. (2004). Development and validation of a fully modular platform for the numerical modeling of air pollution : POLAIR. *Int. J. of Environment and Pollution*, 22:17–28.
- [Bouttier et Courtier, 1999] BOUTTIER, F. et COURTIER, P. (1999). Data assimilation concepts and methods. Rapport technique, ECMWF.
- [Brandt, 1998] BRANDT, J. (1998). *Modelling Transport, Dispersion and Deposition of Passive Tracers from Accidental Releases*. Thèse de doctorat, National Environmental Research Institute, Roskilde, Danemark.
- [Brandt *et al.*, 2002] BRANDT, J., CHRISTENSEN, J. et FROHN, L. (2002). Modelling transport and deposition of caesium and iodine from the Chernobyl accident using the DREAM model. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2:397–417.
- [Briggs, 1973] BRIGGS, G. (1973). Diffusion estimation for small emissions. Rapport technique, Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, États-Unis.
- [Buckley, 1999] BUCKLEY, R. L. (1999). Modeling atmospheric deposition from a cesium release in Spain using a stochastic transport model. Rapport technique, Westinghouse Savannah River Company, États-Unis.
- [Byrd *et al.*, 1995] BYRD, H., LU, P., NOCEDAL, J. et ZHU, C. (1995). A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM J. Scientific Computing*, 16(5):1190–1208.
- [Chamberlain, 1991] CHAMBERLAIN, A. C. (1991). *Radioactive aerosols*. Cambridge University Press.
- [Clark et Smith, 1988] CLARK, M. et SMITH, F. B. (1988). Wet and dry deposition of Chernobyl releases. *Nature*, (332):245–249.
- [Cooper *et al.*, 2003] COOPER, J., RANDLE, K. et SOKHI, R. (2003). *Radioactive Releases in the Environment. Impact and Assessment*. John Wiley & Sons, Ltd, England.
- [Courtier, 1997] COURTIER, P. (1997). Dual formulation of four-dimensional variational assimilation. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, (123):2449–2461.
- [Crabot *et al.*, 1999] CRABOL, B., EBERBACH, F., MANESSE, D., MABMEYER, K., MONFORT, M., NESTER, K. et SCHANDT, H. (1999). Modèle franco-allemand pour le calcul de la dispersion atmosphérique en cas d'accident nucléaire - Commission franco-allemand chargée des problèmes de sûreté des installations nucléaires. Rapport technique 99-077, IPSN, DPEA/SECRI, France.
- [Craven et Wahba, 1979] CRAVEN, P. et WAHBA, G. (1979). Smoothing Noisy Data with Spline Functions. Estimating the Correct Degree of Smoothing by the Method of Generalized Cross-Validation. *Numerische Mathematik*, 31:377–403.

- [Daley, 1991] DALEY, R. (1991). *Atmospheric data analyses*. Cambridge University Press.
- [Davoine, 2006] DAVOINE, X. (2006). Modélisation inverse de rejets accidentels dans l'atmosphère : application à des cas réels (ETEX, Tchernobyl). Mémoire de D.E.A., ENSTA.
- [De Boeck, 1997] DE BOECK, B. (1997). Introduction to Severe Accidents. Especially to Containment Behaviour. Rapport technique VN-97/013, Association Vinçotte Nucléaire, Belgique.
- [De Cort *et al.*, 1998] DE CORT, M., DUBOIS, G., FRIDMAN, S., GERMENCHUK, M., IZRAEL, Y., JANSSENS, A., JONES, A., KELLY, G., KVASNIKOVA, E., MATVEENKO, I., NAZAROV, I., POKUMEIKO, Y., SITAK, V., STUKIN, E., TABACHNYI, L., TSATUROV, Y. et AVDYUSHIN, S. (1998). Atlas of caesium deposition on europe after the Chernobyl accident. Rapport technique 16733 EN-RU, Commission of the European Communities.
- [De Haan, 1999] DE HAAN, P. (1999). *Studies on Short-Range Air Pollution Modelling*. Thèse de doctorat, École Polytechnique Fédérale de Zurich, Suisse.
- [Doury, 1976] DOURY, A. (1976). Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère. Rapport technique R 4280, CEA, France.
- [Drews, 2005] DREWS, M. (2005). *Data assimilation on atmospheric dispersion of radioactive materials*. Thèse de doctorat, Technical University of Denmark and Risø National Laboratory, Danemark.
- [Dubois et Bossew, 2003] DUBOIS, G. et BOSSEW, P. (2003). Spatial analysis of ^{137}Cs in the environment : an overview on the current experience. In *Mapping radioactivity in the environment. Spatial Interpolation Comparison 1997*, numéro EUR 20667 EN, pages 21–36.
- [Elbern et Schmidt, 1999] ELBERN, H. et SCHMIDT, H. (1999). A four-dimensional variational chemistry data assimilation scheme for Eulerian chemistry transport modeling. *J. Geophys. R.*, 104:18583–18598.
- [Elbern *et al.*, 2000] ELBERN, H., SCHMIDT, H., TALAGRAND, O. et EBEL, A. (2000). 4D variational data assimilation with an adjoint air quality model for emission analysis. *Environ. Mod. Softw.*, 15:539–548.
- [Fan *et al.*, 1999] FAN, S.-M., SARMIENTO, J. L., GLOOR, M. et PACALA, S. (1999). On the use of regularization techniques in the inverse modeling of atmospheric carbon dioxide. *J. Geophys. R.*, 104:21503–21512.
- [Faure et Papegay, 1998] FAURE, C. et PAPEGAY, Y. (1998). *Odyssée user's guide*. version 1.7. Rapport technique RT-0224, INRIA, France.
- [Galmarini *et al.*, 2004a] GALMARINI, S., BIANCONI, R., KLUG, W., MIKKELSEN, T., ADDIS, R., ANDRONOPOULOS, S., ASTRUP, P., BAKLANOV, A., BARTNIKI, J., BARTZIS, J. C., BELLASIO, R., BOMPAY, F., BUCKLEY, R., BOUZOM, M., CHAMPION, H., D'AMOURS, R., DAVAKIS, E., ELEVELD, H., GEERTSEMA, G., GAALB, H., KOLLAX, M., ILVONEN, M., MANNING, A., PECHINGER, U., PERSSON, C., POLREICH, E., POTEMSKI, S., PRODANOVA, M., SALTBONES, J., SLAPER, H., SOFIEV, M., SYRAKOV, D., SØRENSEN, J., der AUWERA I. VALKAMA, L. V. et ŽELAZNY, R. (2004a). Ensemble dispersion forecasting – Part I : concept, approach and indicators. *Atmospheric Environment*, 38(28):4,607–4,617.

- [Galmarini *et al.*, 2004b] GALMARINI, S., BIANCONI, R., KLUG, W., MIKKELSEN, T., ADDIS, R., ANDRONOPOULOS, S., ASTRUP, P., BAKLANOV, A., BARTNIKI, J., BARTZIS, J. C., BELLASIO, R., BOMPAY, F., BUCKLEY, R., BOUZOM, M., CHAMPION, H., D'AMOURS, R., DAVAKIS, E., ELEVELD, H., GEERTSEMA, G., GAALB, H., KOLLAX, M., ILVONEN, M., MANNING, A., PECHINGER, U., PERSSON, C., POLREICH, E., POTEMSKI, S., PRODANOVA, M., SALTBOONES, J., SLAPER, H., SOFIEV, M., SYRAKOV, D., SØRENSEN, J., der AUWERA I. VALKAMA, L. V. et ŽELAZNY, R. (2004b). Ensemble dispersion forecasting – Part II : application and evaluation. *Atmospheric Environment*, 38(28):4,619–4,632.
- [Gifford, 1961] GIFFORD, F. (1961). Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion. *Nuclear Safety*, 2:47–51.
- [Graziani *et al.*, 2000] GRAZIANI, G., GALMARINI, S. et MIKKELSEN, T. (2000). RT-MOD : Real-Time MODEL Evaluation. Rapport technique, Risø, Danemark.
- [Griffith, 1997] GRIFFITH, A. (1997). *Data Assimilation for Numerical Weather Prediction Using Control Theory*. Thèse de doctorat, University of Reading.
- [Gudiksen et Lange, 1986] GUDI KSEN, P. et LANGE, R. (1986). Atmospheric dispersion modeling of radioactivity releases from the Chernobyl event. Rapport technique UCRL - 95363, Lawrence Livermore National Laboratory, États-Unis.
- [Hass *et al.*, 1990] HASS, H., MEMMESHEIMER, M., GEISS, H., JAKOBS, H. et EBEL, A. (1990). Simulation of the Chernobyl radioactive cloud over Europe using the EURAD model. *Atmospheric Environment*, 24A(3):673–692.
- [Hourdin et Issartel, 2006] HOURDIN, F. et ISSARTEL, J.-P. (2006). Sub-surface nuclear tests monitoring through the CTBT xenon network. *Geophysical Research Letters*, 27(15):2245–2248.
- [Hourdin *et al.*, 2006] HOURDIN, F., TALAGRAND, O. et IDELKADI, A. (2006). Eulerian backtracking of atmospheric tracers II : numerical aspects. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, 132:585–603.
- [Ide *et al.*, 1997] IDE, K., COURTIER, P., GHIL, M. et LORENC, A. (1997). Unified notation for data assimilation : Operational, sequential and variational. *J. Meteor. Soc. Japan*, (75):181–189.
- [Isnard *et al.*, 2005] ISNARD, O., KRISTA, M., BOCQUET, M., DUBIAU, P. et SPORTISSE, B. (2005). Data assimilation of radionuclides atmospheric dispersion at small scale : a tool to assess the consequences of radiological emergencies. *In Proceedings of the IAEA Conference*.
- [Issartel et Baverel, 2003] ISSARTEL, J.-P. et BAVEREL, J. (2003). Inverse transport for the verification of the Comprehensive Nuclear Test Ban Treaty. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 3:475–486.
- [Jaynes, 1957a] JAYNES, E. (1957a). Information statistics and statistical mechanics. *Phys. Rev.*, 106:620.
- [Jaynes, 1957b] JAYNES, E. (1957b). Information statistics and statistical mechanics II. *Phys. Rev.*, 108:171.
- [Kalman, 1960] KALMAN, R. E. (1960). A new approach to linear filtering and prediction problems. *Transactions of the ASME–Journal of Basic Engineering*, 82(Series D):35–45.

- [Kalnay, 2002] KALNAY, E. (2002). *Atmospheric Modeling, Data Assimilation and Predictability*. Cambridge University Press.
- [Kaminski *et al.*, 1999a] KAMINSKI, T., HEINMANN, M. et GIERING, R. (1999a). A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport : I Adjoint model and Jacobian matrix. *J. Geophys. R.*, 104:18535–18553.
- [Kaminski *et al.*, 1999b] KAMINSKI, T., HEINMANN, M. et GIERING, R. (1999b). A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport : II Inversion of the transport of CO₂ in the 1980s. *J. Geophys. R.*, 104:18555–18581.
- [Kanevsky *et al.*, 1997] KANEVSKY, M., ARUTYUNYAN, R., BOLSHOV, L., CHERNOV, S., DEMYANOV, V., KOPELOVA, N., LINGE, I., SAVELIEVA, E., HAAS, T. et MAIGNAN, M. (1997). Chernobyl fallout : Review of advanced spatial data analysis. In A. SOARES ET AL., éditeur : *geoENV I-Geostatistics for Environmental Applications*, pages 389–400. Kluwer Academic Publishers, the Netherlands.
- [Klug *et al.*, 1992] KLUG, W., GRAZIANI, G., GRIPPA, G., PIERCE, D. et TASSONE, C. (1992). *Evaluation of long-range atmospheric transport models using environmental radioactivity data from the Chernobyl accident. The ATMES Report*. Elsevier, Amsterdam.
- [Kontarev, 1980] KONTAREV, G. (1980). The adjoint equation technique applied to meteorological problems. Rapport technique 21, ECMWF.
- [Krysta et Bocquet, 2006] KRYSTA, M. et BOCQUET, M. (2006). Source reconstruction of an accidental radionuclide release at European scale. Soumis à *Q.J.R.Meteorol.Soc.*
- [Krysta *et al.*, 2005a] KRYSTA, M., BOCQUET, M., ISNARD, O., ISSARTEL, J.-P. et SPORTISSE, B. (2005a). Data assimilation of radionuclides at small and regional scale. In I. FARAGO ET AL., éditeur : *Advances in Air Pollution Modeling for Environmental Security*, pages 275–284. Springer, the Netherlands.
- [Krysta *et al.*, 2005b] KRYSTA, M., BOCQUET, M. et QUÉLO, D. (2005b). Source Reconstruction for Accidental Releases of Radionuclides. In EBEL, A. et DAVITASHVILI, T., éditeurs : *Air, Water and Soil Quality Modelling for Risk and Impact Assessment*. Accepté.
- [Krysta *et al.*, 2006] KRYSTA, M., BOCQUET, M., SPORTISSE, B. et ISNARD, O. (2006). Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides : an application to wind tunnel data. Accepté dans *Atmospheric Environment*.
- [Langner *et al.*, 1998] LANGNER, J., ROBERTSON, L., PERSSON, C. et ULLERSTIG, A. (1998). Validation of the Operational Emergency Response Model at the Swedish Meteorological and Hydrological Institute Using Data from ETEX and the Chernobyl Accident. *Atmospheric Environment*, 32(24):4325–4333.
- [Le Dimet et Talagrand, 1986] LE DIMET, F. X. et TALAGRAND, O. (1986). Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects. *Tellus*, 38A:97–110.
- [Louis, 1979] LOUIS, J.-F. (1979). A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, 17:187–202.
- [Magill et Galy, 2005] MAGILL, J. et GALY, J. (2005). *Radioactivity Radionuclides Radiation*. Springer.
- [Mahura *et al.*, 2003] MAHURA, A., BAKLANOV, A. et SØRENSEN, J. H. (2003). Long-term probabilistic atmospheric transport and deposition patterns from nuclear risk sites in Euro-Arctic region. Rapport technique 03-14, DMI, Danemark.

- [Mallet et Sportisse, 2005] MALLET, V. et SPORTISSE, B. (2005). Data processing and parameterizations in atmospheric chemistry and physics : the ATMODATA library. Rapport technique 12, CEREAA, France.
- [Marchuk et Penenko, 1979] MARCHUK, G. et PENENKO, V. (1979). A study of the sensitivity of discrete models of atmospheric and ocean dynamics. *Atmospheric and Oceanic Physics*, 15(11):785–789.
- [Maryon et Best, 1995] MARYON, R. et BEST, M. (1995). Estimating emissions from a nuclear accident using observations of radioactivity with dispersion model products. *Atmospheric Environment*, 29(15):1853–1869.
- [Mosca *et al.*, 1998] MOSCA, S., GRAZIANI, G., KLUG, W., BELLASIO, R. et BIANCONI, R. (1998). A statistical methodology for evaluation of long-range dispersion models : An application to the ETEX exercise. *Atmospheric Environment*, 41(24):4307–4324.
- [Méjean, 2003] MÉJEAN, P. (2003). Dispersion atmosphérique sur le site de la centrale EDF de Bugey - Essais en soufflerie. Rapport technique, LMFA, France.
- [NEA, 2003] NEA (2003). Assessment of radiological and health impacts. 2002 Update of Chernobyl : Ten years on. Rapport technique, Nuclear Energy Agency. Organisation for Economic Co-operation and Development.
- [Nichols, 2003a] NICHOLS, N. (2003a). Data Assimilation : Aims and Basic Concepts. In R. SWINBANK ET AL., éditeur : *Data Assimilation for the Earth System*, pages 9–20. Kluwer Academic Publishers, the Netherlands.
- [Nichols, 2003b] NICHOLS, N. (2003b). Treating Model Error in 3-D and 4-D Data Assimilation. In R. SWINBANK ET AL., éditeur : *Data Assimilation for the Earth System*, pages 127–135. Kluwer Academic Publishers, the Netherlands.
- [Nodop, 1997] NODOP, K., éditeur (1997). *ETEX symposium on long-range atmospheric transport, model verification and emergency response, 13-16 May 1997, Vienna, Austria*. Office for Official Publications of the European Communities.
- [Nuclear Energy Institut, 1997] Nuclear Energy INSTITUT, Washington, É.-U. (1997). Soviet-Designed Nuclear Power Plants in Russia, Ukraine, Lithuania, Armenia, the Czech Republic, the Slovak republic, Hungary and Bulgaria.
- [Päsler-Sauer, 2003] PÄSLER-SAUER, J. (2003). Description of the atmospheric dispersion model ATSTEP. Rapport technique RODOS(RA2)-TN(03)-01.
- [Pasquill, 1961] PASQUILL, F. (1961). The estimation of the dispersion of windborn material. *Meteorol. Mag.*, 90:33–49.
- [Penenko *et al.*, 2002] PENENKO, V., BAKLANOV, A. et TSVETOVA, E. (2002). Methods of sensitivity theory and inverse modeling for estimation of source parameters. *Future Generation Computer Systems*, 18:661–671.
- [Politis et Robertson, 2004] POLITIS, K. et ROBERTSON, L. (2004). Bayesian updating of atmospheric dispersion after a nuclear accident. *Appl. Statist.*, 53(4):583–600.
- [Puch *et al.*, 2002] PUCH, R., ASTRUP, P., SMITH, J., WYNN, H., TURCANU, C. et ROJAS-PALMA, C. (2002). A data assimilation methodology for the plume phase of nuclear accident. In BREBBIA, A. et ZANNETTI, P., éditeurs : *Developments and Application of Computer Techniques to Environmental Studies IX*, pages 129–138. Wessex Institute of Technology Press, Southampton, UK.

- [Puch et Astrup, 2004] PUCH, R. O. et ASTRUP, P. (2004). An Extended Kalman Filter Methodology for the Plume Phase of a Nuclear Accident. Rapport technique RODOS(RA5)-TN(01)-07, Draft.
- [Pudykiewicz, 1989a] PUDYKIEWICZ, J. (1989a). Numerical simulation of the transport of radioactive cloud from the Chernobyl nuclear accident. *Tellus*, 40B:241–259.
- [Pudykiewicz, 1989b] PUDYKIEWICZ, J. (1989b). Simulation of the Chernobyl dispersion with a 3-D hemispheric tracer model. *Tellus*, 41B:391–412.
- [Pudykiewicz, 1998] PUDYKIEWICZ, J. (1998). Application of adjoint transport tracer equations for evaluating source parameters. *Atmospheric Environment*, 32:3039–3050.
- [Quélo *et al.*, 2006] QUÉLO, D., KRISTA, M., BOCQUET, M., ISNARD, O., MINIER, Y. et SPORTISSE, B. (2006). Validation of the POLYPHEMUS platform : the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases. Soumis à *Atmospheric Environment*.
- [Quélo *et al.*, 2005] QUÉLO, D., SPORTISSE, B. et ISNARD, O. (2005). Data assimilation for short range atmospheric dispersion of radionuclides : a case study of second-order sensitivity. *Journal of Environmental Radioactivity*, 84(3):393–408.
- [Raes *et al.*, 1991] RAES, F., CATERINA, T., GIANNI, G., NICOLAS, Z. et GRAZIANI, G. (1991). Updating long range transport model predictions using real time monitoring data in case of nuclear accidents with release to the atmosphere. *Atmospheric Environment*, 25A(12):2807–2814.
- [Ranyard, 1996] RANYARD, D. C. (1996). *Decision Support for Nuclear Emergency Response*. Thèse de doctorat, University of Leeds, School of Computer Studies, Royaume-Uni.
- [Rayner *et al.*, 1999] RAYNER, P., ENTING, I., FRANCEY, R. et LANGENFELDS, R. (1999). Reconstructing the recent carbon cycle from atmospheric CO₂, d13C and O₂/N₂ observations. *Tellus*, 51B:123–232.
- [Robertson et Langner, 1997] ROBERTSON, L. et LANGNER, J. (1997). Variational assimilation of ETEX-I data. In NODOP, K., éditeur : *ETEX symposium on long-range atmospheric transport, model verification and emergency response, 13-16 May 1997, Vienna, Austria*, pages 235–238. Office for Official Publications of the European Communities.
- [Robertson et Persson, 1993] ROBERTSON, L. et PERSSON, C. (1993). Attempts to apply four dimensional data assimilation of radiological data using the adjoint technique. *Radiation Protection Dosimetry*, 50(2–4):333–337.
- [Rojas-Palma *et al.*, 2003] ROJAS-PALMA, C., MADSEN, H., GERING, F., PUCH, R., TURCANU, C., ASTRUP, P., MÜLLER, H., RICHTER, K., ZHELEZNYAK, M., TREEBUSHNY, D., KOLOMEEV, M., KAMAIEV, D. et WYNN, H. (2003). Data assimilation in the decision support system RODOS. *Radiation Protection Dosimetry*, 104(1):31–40.
- [Roustan et Bocquet, 2005] ROUSTAN, Y. et BOCQUET, M. (2005). Sensitivity analysis of mercury over Europe. Accepté dans *J. Geophys. R.*
- [Sartelet *et al.*, 2002] SARTELET, K., BOUTAHAR, J., QUÉLO, D., COLL, I., PLION, P. et SPORTISSE, B. (2002). Development and validation of a 3D chemistry-transport model, POLAIR3D, by comparison with data from ESQUIF campaign. In *Proceedings of the 6th Gloream workshop : Global and regional atmospheric modeling*, pages 140–146.

- [Seibert et Frank, 2004] SEIBERT, P. et FRANK, A. (2004). Source-receptor matrix calculation with a Lagrangian particle dispersion model in backward mode. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 4:51–63.
- [Seinfeld et Pandis, 1998] SEINFELD, J. H. et PANDIS, S. N. (1998). *Atmospheric Chemistry and Physics. From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley & Sons, Inc.
- [Sofiev et al., 2006a] SOFIEV, M., SILJAMO, P., VALKAMA, I., ILVONEN, M. et KUKKONEN, J. (2006a). A dispersion modelling system SILAM and its evaluation against ETEX data. *Atmospheric Environment*, 40:674–685.
- [Sofiev et al., 2006b] SOFIEV, M., VALKAMA, I., FORTELIUS, C. et SILJAMO, P. (2006b). Modelling re-analysis of the Chernobyl accident : model evaluation and source apportionment. EGU06-A-09026 ; AS3.06-1MO2O-006 Abstract.
- [Spee, 1998] SPEE, E. (1998). *Numerical methods in global transport-chemistry models*. Thèse de doctorat, Univ. Amsterdam, Pays-Bas.
- [Sportisse, 2005] SPORTISSE, B. (2005). Quelques éléments de paramétrisations du dépôt sec et du lessivage humide pour les runs Tchernobyl de POLYPHEMUS/POLAIR3D. Rapport technique 2005-27, CEREAA, France.
- [Straka et al., 1981] STRAKA, J., GEISS, H. et VOGT, J. (1981). Diffusion of waste air puffs and plumes under changing weather conditions. *Contributions to Atmospheric Physics*, 54(2):207–221.
- [Talagrand et Courtier, 1987] TALAGRAND, O. et COURTIER, P. (1987). Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I : Theory. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, 113:1311–1328.
- [Thiria et al., 2006] THIRIA, S., BADRAN, F. et SORROR, C. (2006). YAO : Un logiciel pour les modèles numériques de l’assimilation de données. Rapport technique, LOCEAN, France.
- [Todling, 1999] TODLING, R. (1999). Estimation theory and foundations of atmospheric data assimilation. Rapport technique, Goddard Space Flight Center, NASA, États-Unis.
- [Troen et Mahrt, 1986] TROEN, I. et MAHRT, L. (1986). A simple model of the atmospheric boundary layer ; sensitivity to surface evaporation. *Boundary-Layer Meteorology*, 37:129–148.
- [Turner, 1969] TURNER, D. (1969). Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates. Rapport technique USEPA 999-AP-26, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, États-Unis.
- [Uliasz, 1983] ULIASZ, M. (1983). Application of the perturbation theory to the sensitivity analysis of an air pollution model. *Zeitschrift für Meteorologie*, 33:355–362.
- [Uliasz, 1987] ULIASZ, M. (1987). Application of the influence functions in numerical modelling of air pollution dispersion. *Przegląd Geofizyczny*, XXXII(1):3–19.
- [Uliasz et Pielke, 1991] ULIASZ, M. et PIELKE, R. (1991). Application of the receptor oriented approach in mesoscale dispersion modeling. In van DOP, H. et STEYN, D., éditeurs : *Air Pollution Modeling and Its Applications VIII*, pages 399–407. Plenum Press, New York.

- [UNSCEAR, 2000] UNSCEAR (2000). Sources and Effects of Ionizing Radiation. Annex J : exposure and effects of the Chernobyl accident. Rapport technique, United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation.
- [Verwer *et al.*, 1998a] VERWER, J., HUNSDORFER, W. et BLOM, J. (1998a). Numerical time integration for air pollution models. Rapport technique, CWI, Pays-Bas.
- [Verwer *et al.*, 1998b] VERWER, J., HUNSDORFER, W. et BLOM, J. (1998b). Numerical time integration for air pollution models. *In Proceedings of the Conference APMS'98*. ENPC-INRIA.
- [Verwer *et al.*, 1999] VERWER, J., SPEE, E., BLOM, J. et HUNSDORFER, W. (1999). A second order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problem. *SIAM J. Scientific Computing*, 20(4):1456–1480.
- [Vogt *et al.*, 1998] VOGT, P., POGNAZ, B., F.J.ALUZZI, R.L.BASKETT et T.J.SULLIVAN (1998). ARAC Simulation of the Algeciras, Spain Steel Mill ¹³⁷Cs Release. Rapport technique JC-131330, Lawrence Livermore National Laboratory, États-Unis.
- [Warner et Harrison, 1993] WARNER, F. et HARRISON, R., éditeurs (1993). *Radioecology after Chernobyl. Biogeochemical Pathways of Artificial Radionuclides*.
- [Wotawa *et al.*, 2003] WOTAWA, G., GEER, L.-E. D., DENIER, P., KALINOWSKI, M., TOIVONEN, H., D'AMOURS, R., DESIATO, F., ISSARTEL, J.-P., LANGER, M., SEIBERT, P., FRANK, A., SLOAN, C. et YAMAZAWA, H. (2003). Atmospheric transport modelling in support of CTBT verification - overview and basic concepts. *Atmospheric Environment*, 37:2529–2537.
- [Zhijin et Navon, 2001] ZHIJIN, L. et NAVON, I. M. (2001). Optimality of variational data assimilation and its relationship with the Kalman filter and smoother. *Q.J.R.Meteorol.Soc.*, 127:661–683.

Résumé

La justification de l'application de l'assimilation de données à la dispersion de radionucléides découle de la confrontation de modèles aux observations. En champ proche, l'approche variationnelle standard a permis de coupler l'adjoint du modèle de dispersion, PX 0.1, et des mesures collectées dans une soufflerie. Le débit de la source a été inversé. L'optimisation des paramètres de forçage, qui gouvernent la forme géométrique du panache, a amélioré l'accord entre les mesures et le modèle. La réduction des réseaux de mesures a été abordée. À l'échelle continentale, la méthode du maximum d'entropie a été utilisée pour reconstruire des sources. Des nouvelles fonctions coût, adaptées au problème, ont été construites. Leur performance a été illustrée sur une série des mesures synthétiques, parfaites et bruitées, générées par le modèle POLAIR 3D. Une méthode opérationnelle de réduction des sites suspectés a été testée. Le profil temporel de la source de l'incident d'Algésiras a été inversé.

Mots-clés : assimilation de données variationnelle, inversion de sources, principe du maximum d'entropie sur la moyenne, dispersion de radionucléides

Abstract

Model-to-data comparisons justify using data assimilation in dispersion of radionuclides. Near-field measurements collected in a wind tunnel experiment have been coupled to an adjoint of the dispersion model, PX 0.1. Standard variational data assimilation has enabled inversion of activity rate. Forcing parameters that define the geometric form of a plume have been optimised and a better model-to-data agreement has been achieved. Reduction of measurement networks has been tackled. At continental scale, the maximum entropy method has been used to invert sources of accidental releases. New, problem-adapted cost functions have been derived. They have been tested on twin experiments using perfect or noisy measurements that have been generated by POLAIR 3D. An operationally useful method of reducing the number of suspected sites has been shown. The temporal profile of the source of Algeciras incident has been inverted.

Keywords : variational data assimilation, source inversion, maximum entropy on the mean principle, radionuclide dispersion