

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÈLE LAGRANGIEN STOCHASTIQUE POUR LA SIMULATION
DE LA DISPERSION DES PARTICULES DANS LA COUCHE
LIMITE ATMOSPHERIQUE

STÉPHANE GAUDREULT
DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET DE GÉNIE INDUSTRIEL
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
AOÛT 2006

© Stéphane Gaudreault, 2006.



Library and
Archives Canada

Bibliothèque et
Archives Canada

Published Heritage
Branch

Direction du
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 978-0-494-19304-4

Our file Notre référence

ISBN: 978-0-494-19304-4

NOTICE:

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.


Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÈLE LAGRANGIEN STOCHASTIQUE POUR LA SIMULATION
DE LA DISPERSION DES PARTICULES DANS LA COUCHE
LIMITE ATMOSPHERIQUE

présenté par : GAUDREAUULT Stéphane

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. LAFOREST Marc, Ph.D., président

M. HERTZ Alain, Doct. ès Sc., membre et directeur de recherche

Mme BOUCHET Véronique, Ph.D., membre et codirectrice de recherche

M. D'AMOURS Réal, M.Sc., membre

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mes directeurs de recherche, Dr Alain Hertz et Dr Véronique Bouchet, qui m'ont donné la chance de réaliser ce projet de maîtrise.

J'adresse aussi mes remerciements à mon employeur Environnement Canada, en particulier à Michel Jean, pour son support financier et pour m'avoir permis d'adapter mon horaire afin de concilier les exigences du travail et des études. Je remercie aussi le Dr Gilles Savard pour son appui financier au début de ma maîtrise.

Mes remerciements vont aussi à tous les membres des groupes AQMAD et CMOE pour leurs conseils et leur gentillesse. Un merci tout particulier à Sylvain Ménard, Jacinthe Racine et Dr Mehrez Samaali pour leurs commentaires sur mon mémoire, ainsi qu'à mes collègues informaticiens Hugo Landry, Jean-Philippe Gauthier, Samuel Gilbert et Serge Trudel pour leur support.

Je remercie particulièrement ma conjointe Nathalie pour sa patience, sa compréhension et son appui durant la poursuite de mes études. Merci à mes parents qui m'ont encouragé à me lancer dans cette aventure.

Finalement, je tiens à remercier le Ministère des Transports du Québec, en particulier André Babin et Pierre Tremblay, qui m'ont fourni des données d'émissions sur le réseau routier de Montréal. Merci à Mario Benjamin d'Environnement Canada qui m'a fourni des données d'observations pour l'étude du cas de la raffinerie CEZinc.

RÉSUMÉ

Il existe de nombreux modèles permettant de simuler la dispersion des particules fines en suspension dans l'atmosphère. Ceux-ci sont généralement très coûteux en terme de ressources informatiques. Pour plusieurs applications, comme la réponse aux urgences environnementales ou l'étude des impacts environnementaux de la construction d'une route, il est aussi nécessaire d'avoir des modèles à la fois rapide d'exécution et capable de modéliser le transport des particules avec une haute résolution spatiale et temporelle. Dans ce contexte, nous avons développé un modèle permettant de simuler la dispersion des particules fines dans la couche limite atmosphérique.

Après avoir évalué différentes approches, nous avons choisi un modèle de type Lagrangien stochastique. La trajectoire d'un ensemble de particules virtuelles est calculée en intégrant la somme des vitesses d'advection, de déposition et de diffusion. Notre modèle utilise des équations de la physique afin de représenter ces vitesses. Nous avons proposé des modifications à plusieurs algorithmes numériques afin de les résoudre.

Nous avons utilisé ce modèle pour effectuer différentes expériences dans le but d'évaluer les performances des simulations. La simulation d'un incident qui s'est produit en août 2004, à l'usine de raffinage de zinc Noranda CEZinc à Salaberry-de-Valleyfield a été utilisée afin d'évaluer la qualité des résultats de notre modèle. Le modèle a prévu des concentrations qui sont inférieures à celles observées. Il y a toutefois une bonne corrélation (environ 0.75) entre ces résultats et les mesures. Ces résultats sont semblables à ceux qui ont été obtenus par Environnement Canada, lors de la réponse à l'urgence, avec le modèle MLDP0. Un exemple d'application du modèle à la simulation de la

dispersion des polluants émis par les véhicules sur l'Île de Montréal est aussi présenté.

ABSTRACT

Many models can be used to simulate the dispersion of the fine particles in suspension in the atmosphere. They are generally very expensive in term of computing resources. In many case, as the environmental emergency response or the study of road construction environmental impacts, it is necessary to have efficient models with high spatial and temporal resolution. In this context, we developed a model to simulate the dispersion of fine particles in the atmospheric boundary layer.

We evaluated various approaches and we chose to use the stochastic Lagrangian approach. The trajectories of a large number of virtual particles are calculated by integrating the sum of three speeds: advection, deposition and diffusion. Our model uses physical equations to represent these speeds. We proposed modifications with several numerical algorithms in order to solve them.

Various experiments were performed with this model to evaluate the quality of the simulations. The simulation of an incident at the Noranda CEZinc zinc refinery in August 2004 was used to evaluate the results of our model. The simulated concentrations are lower than observations. However, there is a good correlation (approximately 0.75) between the simulation results and the measurements. These results are similar to those obtained by Environment Canada with the MLDP0 model. We also presented a simulation of the dispersion of pollutants emitted by the vehicles on the Montreal Island.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS.....	iv
RÉSUMÉ.....	v
ABSTRACT.....	vii
TABLE DES MATIÈRES.....	viii
LISTE DES TABLEAUX	x
LISTE DES FIGURES	xi
LISTE DES SIGLES ET ABREVIATIONS	xiii
LISTE DES ANNEXES.....	xv
INTRODUCTION	1
Mise en contexte.....	1
But et objectifs	2
Aperçu des différents chapitres.....	3
CHAPITRE 1 : MODÉLISATION DE LA COUCHE LIMITE.....	5
1.1 Description de la couche limite atmosphérique	5
1.2 Modélisation des processus atmosphériques.....	7
1.2.1 Modélisation de la météorologie	7
1.2.2 Modélisation de la dispersion.....	9
1.2.2.1 Modèle Gaussien.....	9
1.2.2.2 Modèle Lagrangien stochastique	12
1.2.2.3 Modèles Eulérien	14
CHAPITRE 2 : DESCRIPTION DU MODÈLE	16
2.1 Choix d'un modèle mathématique.....	16
2.2 Choix d'un modèle pilote	16
2.3 Modélisation de la trajectoire d'une particule virtuelle	18
2.3.1 Calcul de la vitesse d'advection	19

2.3.2	Algorithme de résolution de l'équation d'advection	20
2.3.3	Calcul de la vitesse de diffusion et déplacement des particules ..	22
2.3.4	Algorithme de résolution de l'équation de diffusion et déplacement de la particule	27
2.4	Conditions frontières et initiales	32
2.4.1	Problèmes aux frontières de la couche limite.....	32
2.4.2	Dépôt sec des particules.....	35
2.4.3	Modélisation des sources d'émissions.....	38
2.5	Calcul des concentrations	41
2.5.1	Comparaison avec les autres modèles Lagrangiens stochastiques d'ordre un	43
CHAPITRE 3 : ÉVALUATION DU MODÈLE		45
3.1	Vérification du calcul de la vitesse de dépôt sec.....	45
3.2	Vérification du calcul de la vitesse de diffusion et des conditions aux frontières.....	47
3.3	Incident à la raffinerie Noranda CEZinc de Salaberry-de-Valleyfield...	50
3.4	Application à la simulation de la dispersion des particules fines émises sur le réseau routier de la région de Montréal	64
CONCLUSION		70
Travaux futurs		72
RÉFÉRENCES		74
ANNEXES		83

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1 : Erreur absolue maximum des algorithmes de Manella, d'Ermak et d'Euler par rapport à l'état de référence (10000 particules) après une simulation de 100 heures	49
Tableau 3.2: Statistiques pour des simulations de l'incident à la raffinerie Noranda CEZinc utilisant des volumes récepteurs de tailles différentes.	63

LISTE DES FIGURES

- Figure 1.1 :** Représentation schématique de la structure de la couche limite.
(source : http://c_turb.club.fr/ventnode3.html) 7
- Figure 3.1 :** Comparaison des valeurs calculées de la vitesse de dépôt sec avec
des observations de Sehmel (1980). 46
- Figure 3.2 :** Comparaison des algorithmes de Manella, d'Ermak, saute-mouton
et d'Euler par rapport à l'état de référence (10000 particules) pour
évaluer le respect du critère de Thompson. 48
- Figure 3.3 :** Grilles utilisées pour générer les champs météorologiques. **A)** Grille
régionale à 15 km de résolution au-dessus de l'Amérique du Nord,
B) Grille LAM à 2.5 km de résolution sur la région du sud du
Québec, **C)** Grille polaire stéréographique nord vraie à 60 degrés
au-dessus de la région de Montréal. 51
- Figure 3.4 :** Cartographie de l'emplacement de la raffinerie Noranda CEZinc (en
jaune) et des stations de mesure de la qualité de l'air (en bleu)... 53
- Figure 3.5 :** Simulation de la progression du panache au-dessus de la région de
Montréal. 56
- Figure 3.6 :** Comparaison entre les concentrations prédites par le modèle et les
mesures de PM_{2.5} prises aux stations de mesure..... 57

- Figure 3.7 :** Comparaison entre les concentrations prédites par le modèle MLDP0 et les mesures de PM2.5 (Paquin et D'Amours, 2005). La ligne brisée représente les concentrations observées et simulées à la position du poste 50 alors que la ligne pleine représente celles au poste 13.....59
- Figure 3.8 :** Position du panache de gaz à 4:15Z (23:15 EDT).....62
- Figure 3.9 :** Réseau routier de la région de Montréal utilisé pour les simulations de dispersion des PM2.5. (Source des données : Ministère des transports du Québec, Service de la modélisation des systèmes de transport, Modèle de transport de la région de Montréal, version 98) 65
- Figure 3.10 :** Comparaison des concentrations de PM2.5 avec des observations lors d'une simulation du réseau routier de la région de Montréal le 6 octobre 2005 à 13:00Z. La position des stations de mesure est montrée à la figure 3.4. (Source des données d'émissions : Ministère des transports du Québec, Service de la modélisation des systèmes de transport, Modèle de transport de la région de Montréal, version 98).....68

LISTE DES SIGLES ET ABREVIATIONS

AURAMS	A Unified Regional Air-quality Modelling System
CALPUFF	Modèle Gaussien de dispersion développé par la firme EarthTech
CHRONOS	Canadian Hemispheric and Regional Ozone and NOx System
cm	Centimètre
CMAQ	Community Multiscale Air Quality
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
E-MAX	Erreur maximale
EPA	Agence de protection de l'environnement des États-Unis
FLEXPART	modèle Lagrangien de particules développé par la Norwegian Institute for Air Research
GEM	Modèle Environnemental Multi-échelle
h	Heure
HAE	Heure avancée de l'est
K	Degré Kelvin
kg	Kilogramme
km	Kilomètre
LAM	Limited Area Model
m	Mètre
m/s	Mètres par seconde
MB	Biais moyen
MC2	Mesoscale Compressible Community model
MLCD	Modèle Lagrangien Courte Distance
MLDP0	Modèle Lagrangien de Dispersion de Particules d'ordre zéro
MLDP1	Modèle Lagrangien de Dispersion de Particules d'ordre un
MM5	Fifth-Generation NCAR / Penn State Mesoscale Model
MOTREM	Modèle de transport de la région de Montréal
NAME	Nuclear Accident Model

PEARSON	Coefficient de corrélation linéaire de Pearson
PM	Particules en suspension dans l'air
PM2.5	Particules en suspension dans l'air, dont le diamètre aérodynamique moyen est inférieur à 2.5 microns
RMSE	Erreur quadratique moyenne
s	Seconde
μm	Micromètre

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE A : STATISTIQUES UTILISÉES POUR LA VÉRIFICATION DU MODÈLE.....	83
--	-----------

INTRODUCTION

Mise en contexte

Depuis quelques décennies, l'environnement revêt une place de plus en plus importante au sein des préoccupations de la population. Le recyclage de divers matériaux a augmenté, les gens se questionnent sur l'utilisation des pesticides et ils tentent de réduire leurs émissions de gaz à effet de serre. Les premiers effets perceptibles du réchauffement climatique, ainsi que le smog au-dessus des grandes villes, sont des signes qui rappellent l'urgence d'agir.

Les activités humaines, en particulier celles reliées au transport routier, sont des causes importantes de la pollution atmosphérique. Les gaz d'échappement, ainsi que l'évaporation d'une partie du carburant produisent plusieurs polluants atmosphériques qui sont nocifs pour la santé humaine (Santé Canada, 2005). Parmi ceux-ci, on retrouve les oxydes d'azote qui peuvent irriter les voies respiratoires, le monoxyde de carbone qui peut diminuer la capacité du sang à transporter l'oxygène et les composés organiques volatils dont certains, comme le benzène et le 1,3-butadiène, qui sont cancérigènes (Santé Canada, 2005). Des particules fines sont aussi mises en suspension dans l'air. Certaines d'entre elles sont émises avec les gaz d'échappement, alors que d'autres sont formées à la suite de réactions chimiques dans l'atmosphère. Les particules fines peuvent aggraver les symptômes des personnes atteintes de maladies respiratoires ou cardiovasculaires (Santé Canada, 2005). Les oxydes d'azote et les composés organiques volatiles émis par les véhicules peuvent aussi réagir chimiquement pour former de l'ozone au sol (Seinfeld et Pandis, 1998). Alors que l'ozone de la stratosphère est bénéfique, puisqu'elle nous protège contre les rayons ultraviolets du soleil,

l'ozone de surface est, quant à elle, un irritant des voies respiratoires (Santé Canada, 2005). De plus, certains gaz émis par les véhicules, comme le dioxyde de carbone, contribuent au réchauffement climatique (Seinfeld et Pandis, 1998).

Étant donné les effets néfastes de la pollution atmosphérique sur la santé, il est important de bien connaître la distribution, ainsi que la concentration des divers polluants auxquels la population est exposée. Pour ce faire, des modèles numériques sont développés afin de simuler sur ordinateur la dispersion des polluants dans l'atmosphère. Ceux-ci servent à prévoir la dispersion future des polluants, ainsi qu'à simuler divers scénarios de réduction d'émissions. Ces scénarios de réduction permettent d'étudier les impacts possibles des politiques environnementales. Les informations obtenues lors de ces simulations permettent de mieux comprendre les interactions complexes qui existent entre de nombreux phénomènes comme l'ozone au sol, les précipitations acides ou encore la pollution due aux particules en suspension. Des réseaux de mesure et de collecte de données ont aussi été mis sur pied. Ces réseaux mesurent les concentrations volumiques de certains polluants dans l'air. La couverture spatiale, ainsi que la fréquence de la prise des mesures peuvent varier d'une station de mesure à l'autre (Bouchet, 2006). Les données ainsi recueillies servent par ailleurs à évaluer et à améliorer la qualité des modèles de prévision. Les informations obtenues par les simulations et les mesures de la qualité de l'air permettent aux décideurs de déterminer quelles sont les actions à prendre afin de réduire les émissions de polluants.

But et objectifs

Ce projet de maîtrise consiste à mettre au point un modèle de dispersion permettant de simuler le transport des particules fines en suspension dans l'air. Le choix d'un type particulier de modèle ainsi que des algorithmes numériques

repose avant tout sur leur efficacité et sur leur précision. Le modèle devra reproduire de façon très détaillée le transport des polluants provenant de sources ponctuelles, comme des industries ou des feux de forêt, ou encore de sources linéaires complexes, comme le réseau routier d'une grande ville. Les algorithmes numériques, quant à eux, devront être efficaces en terme de temps de calcul. Ce modèle sera implanté sur ordinateur afin d'être évalué. Dans le but de nous assurer que les résultats des simulations de ce modèle numérique sont représentatifs de la réalité, nous les comparerons avec des observations.

Aperçu des différents chapitres

Les polluants se dispersent essentiellement dans la couche limite atmosphérique. Dans le chapitre 1, nous définissons la couche limite atmosphérique ainsi que les processus physiques que nous allons modéliser. Nous examinerons aussi différentes approches permettant de simuler le transport des particules dans la couche limite atmosphérique.

Le chapitre 2 décrit l'approche que nous avons choisie. Nous présenterons les équations du modèle, ainsi que les techniques numériques permettant de les résoudre.

Au chapitre 3, nous présenterons diverses expériences réalisées avec notre modèle dans le but de vérifier la validité des simulations. Une simulation de la dispersion d'un nuage de gaz toxique sera présentée. Cette simulation est basée sur un cas réel qui s'est produit en août 2004, à l'usine de raffinage de zinc Noranda CEZinc à Salaberry-de-Valleyfield (Radio-Canada, 2004). Les simulations du modèle sur ce cas seront évaluées en les comparant à des mesures prises par le réseau de surveillance de la qualité de l'air de la ville de Montréal, du Ministère de l'Environnement du Québec et d'Environnement

Canada. Un exemple d'application du modèle à la simulation de la dispersion des polluants émis par les véhicules sur l'Île de Montréal sera finalement présenté.

Dans la conclusion, au chapitre 4, nous récapitulerons les contributions de notre travail, pour ensuite donner un aperçu des nouvelles pistes de recherche qu'il serait intéressant d'explorer.

CHAPITRE 1 : MODÉLISATION DE LA COUCHE LIMITE

1.1 Description de la couche limite atmosphérique

Les polluants se dispersent essentiellement à l'intérieur de la couche limite de l'atmosphère, c'est-à-dire la partie de l'atmosphère qui est directement influencée par la présence du sol, et qui répond à l'action des forces physiques au sol en moins d'une heure (Stull, 1988). Ces forces physiques incluent les transferts de chaleur, l'évaporation, l'émission de polluants et la rugosité de la surface. L'épaisseur de la couche limite varie en fonction du temps et de la position dans l'espace, allant de quelques centaines de mètres à plus de 3000 mètres. (Stull, 1988). La figure 1.1 montre la structure de la couche limite ainsi que la structure des vents dans chaque partie. La couche limite est constituée de trois couches distinctes (Dutton, 1995) :

- **La sous-couche rugueuse**

Partie de la couche limite qui est située juste au-dessus de la surface terrestre. L'épaisseur de cette zone varie de quelques dixièmes de millimètres (au-dessus des océans) à quelques dizaines de mètres (dans les zones fortement urbanisées). L'écoulement de l'air est fortement turbulent dans cette couche. De plus, la friction contre la surface du terrain influe beaucoup sur la vitesse du vent. En règle générale, une surface fortement rugueuse freine considérablement la vitesse du vent.

Ainsi, les forêts et les grandes villes freinent beaucoup le vent, tandis que la surface de l'eau n'influe que très peu l'écoulement de l'air. La longueur de rugosité, notée z_0 , est une mesure de la rugosité du terrain. Elle correspond à la hauteur sous laquelle la vitesse du vent

moyen devient zéro en extrapolant le profile vertical logarithmique de la vitesse du vent.

- **La couche de surface**

Région de la couche limite située au-dessus de la sous-couche rugueuse. L'épaisseur de cette zone est approximativement 100 mètres. Dans cette région, les effets de la force de Coriolis sont négligeables et la vitesse moyenne du vent augmente avec l'altitude selon un profil logarithmique.

- **La couche d'Ekman**

Dans cette région, située au-dessus de la couche de surface, la structure du vent est influencée à la fois par les processus physiques au sol et par la force de Coriolis. La direction du vent y subit progressivement une rotation en direction de celle du vent géostrophique. Le vent géostrophique est le vent en altitude qui ne subit aucune influence directe du sol. Sa direction est principalement influencée par la force de Coriolis.

Lorsque des particules fines sont mises en suspension dans la couche limite de l'atmosphère, elles subissent l'effet de plusieurs processus physiques qui affectent leur trajectoire. De plus, certains processus, comme l'émission et la nucléation, peuvent ajouter de nouvelles particules dans l'atmosphère. D'autres processus, comme le dépôt sec, la sédimentation ainsi que la coagulation, peuvent réduire la quantité de particules présentes dans l'atmosphère (Jacobson, 2005) (Seinfeld et Pandis, 1998).

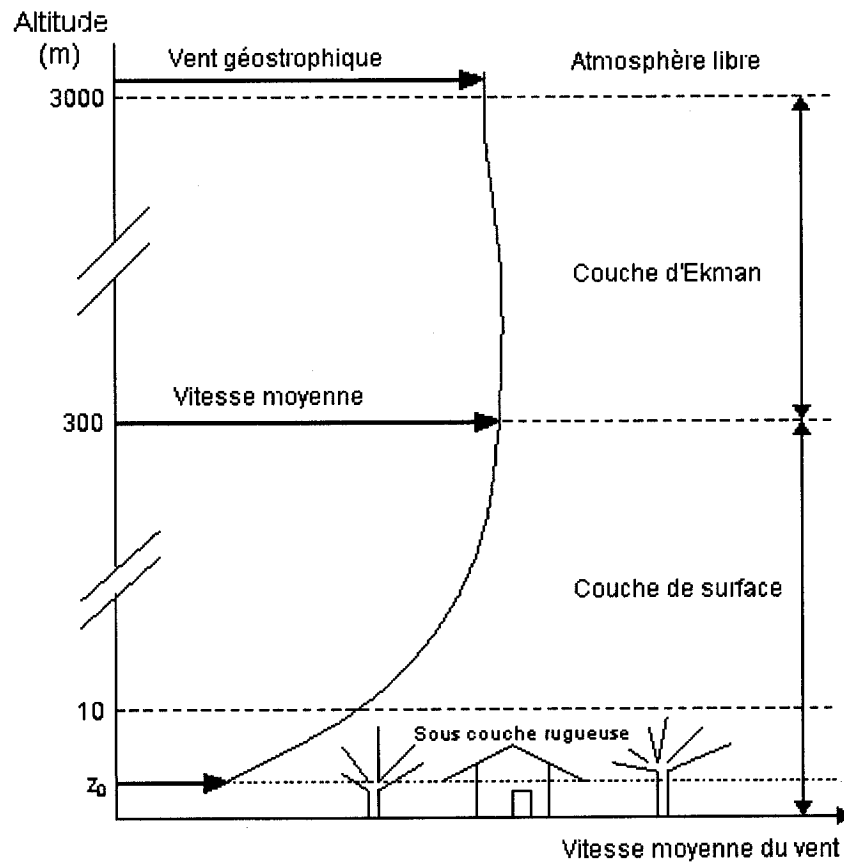


Figure 1.1 : Représentation schématisée de la structure de la couche limite.
(source : http://c_turb.club.fr/ventnode3.html)

1.2 Modélisation des processus atmosphériques

1.2.1 Modélisation de la météorologie

La simulation du transport des particules en suspension dans l'air nécessite des informations détaillées sur l'état de la couche limite de l'atmosphère et sur la morphologie du terrain (Jacobson, 2005). Les informations météorologiques peuvent provenir de mesures prises par des

stations d'observations ou encore de simulations faites par un modèle de prévision météorologique. Un modèle de dispersion peut être couplé à un modèle météorologique donné, qui lui fournit en entrée des données sur l'état de l'atmosphère (modèle hors-ligne), ou encore être construit directement à l'intérieur du modèle météorologique (modèle « en ligne ») (Grell et al, 2005). Dans le cas où le modèle de dispersion est un modèle hors-ligne, le modèle météorologique est appelé un modèle pilote.

Dans un modèle météorologique, l'espace et le temps sont discrétisés. L'espace est divisé en cellules de taille finie formant une grille (Jacobson, 2005). Cette grille est définie sur une projection géographique qui peut couvrir une région donnée ou encore l'ensemble de la planète. Mathématiquement, les différentes variables météorologiques sont donc représentées par des champs scalaires, c'est-à-dire une fonction qui assigne une valeur réelle à chaque point dans l'espace. Les vents, quant à eux, sont représentés par un champ vectoriel. Le temps est aussi divisé en une suite de pas de temps finis.

Le déplacement réel des masses d'air dans l'atmosphère se produit souvent à une échelle spatiale et temporelle beaucoup plus petite que celle qui est représentée par les modèles météorologiques (Jacobson, 2005). Par exemple, la plupart des modèles météorologiques sont incapables de représenter correctement les perturbations dues à des tourbillons qui ont un diamètre de quelques mètres et qui durent quelques secondes ou quelques minutes. Ces modèles prédisent donc plutôt des valeurs moyennes pour chaque pas de temps sur chacune des cellules de la grille. Les diverses variables du fluide, comme la concentration d'un polluant ou encore la vitesse du vent, sont alors décomposées en une composante moyenne et une perturbation. Une telle décomposition s'appelle une décomposition de Reynolds.

1.2.2 Modélisation de la dispersion

Les modèles de dispersion peuvent être classés en trois grandes familles : les modèles Gaussiens, les modèles Lagrangiens et les modèles Eulériens (Jacobson, 2005). L'approche Gaussienne permet de représenter de façon simplifiée la dispersion atmosphérique (Flesh et al., 2002). Les modèles Lagrangiens, quant à eux, permettent de décrire les changements de concentration relativement au fluide en mouvement (Rodean, 1996). Finalement, les modèles Eulériens utilisent un système de coordonnées fixes dans l'espace afin de décrire l'évolution d'un champ de concentration.

1.2.2.1 Modèle Gaussien

Les modèles Gaussiens sont utilisés depuis plusieurs années afin de prévoir la dispersion d'un panache de polluant. Ce sont des modèles relativement simples qui nécessitent peu de ressources informatiques. Les modèles Gaussiens sont basés sur l'équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \langle u'c' \rangle + \frac{\partial}{\partial y} \langle v'c' \rangle + \frac{\partial}{\partial z} \langle w'c' \rangle \quad (1.1)$$

où le champ de concentration, ainsi que la vitesse du vent sont exprimés sous la forme de décompositions de Reynolds (Flesh et al., 2002). Le champ de concentration est donc la somme d'une concentration moyenne C et d'une fluctuation par rapport à la moyenne c' . De même, le vent est représenté par la somme du vent moyen (U, V, W) et d'une perturbation (u', v', w') . La vitesse du vent moyen est supposée constante dans le temps et dans l'espace (Flesh et al., 2002). La turbulence verticale $\langle w'c' \rangle$, est approximée à l'aide de la théorie

en K de Monin-Obukhov comme le produit d'une constante K_z et de la dérivée partielle de la concentration (Seinfeld et Pandis, 1998)

$$\langle w'c' \rangle = -K_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1.2)$$

Dans cette équation, la constante K_z est le coefficient de diffusion vertical (Seinfeld et Pandis, 1998). La turbulence horizontale u' et v' , ainsi que le mouvement synoptique vertical W sont habituellement négligés (Flesh et al., 2002). À partir de ces hypothèses, l'équation (1.1) peut être simplifiée afin d'obtenir le champ de concentration d'un panache de polluants émis en un point $(x, y, z, t) = (0, 0, 0, 0)$

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{(2\pi)^{1.5} \sigma_x^2 \sigma_y^2 \sigma_z^2} \exp \left[\left(\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2} \right) + \left(\frac{(y-Vt)^2}{2\sigma_y^2} \right) + \left(\frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] \quad (1.3)$$

Dans l'équation (1.3), σ_x^2 , σ_y^2 , σ_z^2 sont les variances de la concentration dans chacune des dimensions (Flesh et al., 2002).

Malgré leur apparente sophistication, les modèles Gaussiens sont des approximations simplifiées de la dispersion atmosphérique (Flesh et al., 2002). De plus, certaines hypothèses à la base de ces modèles ne sont pas valides dans tous les cas (Flesh et al., 2002). Par exemple, l'équation (1.3) peut donner une solution erronée si la variation spatiale ou temporelle du vent est très importante (Flesh et al., 2002).

Fait intéressant, il existe des modèles Gaussiens spécialisés afin d'évaluer les niveaux de polluants aux abords des routes (Wikipedia, 2006). Ces modèles sont fréquemment utilisés pour réaliser des études d'impacts environnementaux lors de la construction d'une nouvelle route ou encore lors de travaux majeurs affectant le trafic. Les émissions routières sont évaluées à partir du nombre de véhicules, de leur vitesse, de leur type, ainsi que des conditions météorologiques sur chacune des routes (Brzezinski et Newell, 1998). La concentration C prédite pour un point d'observation situé à une hauteur h et à une distance x d'une source linéaire, est donnée par l'équation :

$$C = \int_0^{\infty} \frac{q}{\pi(ucd^2x^2)(\cos(\alpha))} \left(\exp \frac{-hx^2}{2c^2x^2} \right) dx \quad (1.4)$$

où u est vitesse du vent moyen dans la direction x , α est l'angle d'inclinaison de la source linéaire relativement à un plan de référence, c et d sont respectivement l'écart-type des vents horizontaux et verticaux (Wikipedia, 2006). L'équation (1.4) suppose aussi que les conditions météorologiques ne varient pas spatialement et temporellement. Plus récemment, en 2004, Transports Québec a évalué la faisabilité du modèle gaussien CALPUFF, de la firme EarthTech, pour l'étude de la dispersion des polluants qui sont émis par les véhicules routiers dans la région de Montréal (Babin et Tremblay, 2004) (The Atmospheric Studies Group, 2006). Le modèle CALPUFF utilise une approche beaucoup plus complexe que celle que nous venons de présenter. Par exemple, le coefficient de diffusion K_z verticale, ainsi que la vitesse du vent moyen peuvent varier spatialement et temporellement (The Atmospheric Studies Group, 2006). Ce modèle nécessite par conséquent un temps de calcul et des ressources informatiques importants (Babin et Tremblay, 2004). De plus, l'agence américaine de protection de l'environnement, EPA, considère ce

modèle valide uniquement pour des applications impliquant un transport des polluants dans l'atmosphère sur une distance entre 50 et 200 km (The Atmospheric Studies Group, 2006).

De façon générale, les modèles Gaussiens utilisent des approximations qui ne tiennent pas compte de la complexité de l'atmosphère. Ces approximations servent à calculer des concentrations moyennes à la position d'un récepteur ou sur une grille. Puisque les modèles Gaussiens négligent les effets de la turbulence à petite échelle, ils ne sont pas appropriés pour des applications comme l'étude de l'impact local des politiques de transport.

1.2.2.2 Modèle Lagrangien stochastique

Un modèle Lagrangien stochastique de particules permet de calculer une approximation de la dispersion en calculant les trajectoires de plusieurs centaines de particules virtuelles dans la couche limite (Rodean, 1996). Le système de coordonnées utilisé par les modèles Lagrangiens stochastiques permet de spécifier la position d'une particule à un temps t , relativement à sa position initiale au temps de référence t_0 . La résolution spatiale d'un modèle Lagrangien stochastique est donc indépendante de la grille du modèle pilote.

Chaque particule virtuelle représentée dans le modèle transporte une certaine masse qui peut correspondre à plusieurs particules dans la réalité (Rodean, 1996). Par exemple, une simulation de 100 000 particules virtuelles, transportant chacune une masse de 10 grammes pourraient permettre de simuler un relâchement d'une tonne métrique de particules réelles en un point géographique donné. Le nombre de particules virtuelles d'une simulation est choisi en fonction de la puissance de calcul disponible et de la précision désirée.

Celui-ci est généralement inférieur au nombre de particules réelles du scénario simulé. Par conséquent, plus le nombre de particules virtuelles se rapproche du nombre de particules réelles, plus la simulation devrait, en théorie, être réaliste. Par contre, cela demandera un temps de calcul et un espace mémoire plus importants (Schwere et al., 2002).

Dans un modèle Lagrangien stochastique, on fait l'hypothèse que l'état d'une particule évolue comme un processus Markovien (Wilson et Sawford, 1996). Le comportement futur d'une particule est donc entièrement défini par son état présent. Les états passés, quant à eux, n'ont aucune influence sur son comportement futur. On distingue deux classes de modèles Lagrangiens stochastiques : les modèles d'ordre zéro, dans lesquels l'état d'une particule est simplement sa position, ainsi que les modèles d'ordre un où l'état d'une particule est représenté à la fois par sa position et sa vitesse (Wilson et Sawford, 1996).

Contrairement aux modèles Gaussiens, les équations décrivant la dispersion des particules en coordonnées Lagrangiennes peuvent s'exprimer de façon relativement simple tout en tenant compte de la complexité de l'atmosphère (Rodean, 1996). À chaque pas de temps, il suffit d'évaluer les valeurs de certains champs du modèle pilote à la position de chacune des particules et ensuite de mettre à jour leur trajectoire et leur vitesse. Les trajectoires calculées sont donc valides, même dans le cas où les conditions météorologiques varient en fonction de l'espace et du temps.

Le principal désavantage des modèles Lagrangiens stochastiques est qu'il est difficile de représenter certains processus complexes comme les réactions chimiques entre les particules et les gaz présents dans l'atmosphère. Pour modéliser ces processus, il faut représenter un grand nombre de sources

et plusieurs espèces chimiques. Cela demande un grand nombre de particules virtuelles et un temps de calcul important. Parmi les recherches récentes portant sur ce sujet, il y a celles de Sawford (2006) et de Crone (1999). Ces auteurs ont développé des algorithmes complexes permettant de calculer la concentration des espèces chimiques qui sont transportées par les particules virtuelles.

Les modèles Lagrangiens sont largement utilisés pour la réponse aux urgences environnementales puisqu'ils permettent de modéliser la dispersion à une échelle arbitrairement élevée (Wilson et Sawford, 1996). (Flesh et al., 2004). Pour ces applications, on s'intéresse davantage à la trajectoire du panache de polluants qu'à sa composition chimique.

Parmi les principaux modèles Lagrangiens stochastiques d'ordre un mentionnés dans la littérature scientifique, notons le modèle anglais NAME (Nuclear Accident Model) (Ryall et Maryon, 1998), le modèle européen FLEXPART (Stohl et al., 2005), ainsi que le modèle canadien MLDP1 (Modèle Lagrangien de Dispersion de Particules d'ordre un) (Flesh et al., 2004).

1.2.2.3 Modèles Eulérien

Dans un modèle Eulérien, les propriétés d'un fluide, telles que la densité, la température, la vitesse et la concentration sont spécifiées dans un système de coordonnées fixes, c'est-à-dire en un point donné de l'espace et pour un certain temps t (Rodean, 1996 ; Seinfeld et Pandis, 1998 ; Jacobson, 2005). Ce système de coordonnées est généralement défini par rapport à une grille (Jacobson, 2005). Les concentrations prédites pour chacune des espèces chimiques sont des concentrations moyennes sur chacune des cellules de la grille pour un certain pas de temps (Jacobson, 2005). Ces concentrations peuvent être modifiées à chacun des pas de temps par différents processus

physico-chimiques (Jacobson, 2005). Sous l'action des vents et de la diffusion moléculaire, une certaine quantité de matériel peut se déplacer afin d'entrer ou de sortir de la cellule. Certains processus, comme l'émission et la nucléation, peuvent augmenter la concentration dans une cellule. D'autres processus, comme le dépôt sec, la sédimentation ainsi que la coagulation, peuvent la réduire. Les concentrations des différentes espèces chimiques peuvent aussi être affectées par des réactions chimiques.

L'approche Eulérienne est utilisée par plusieurs modèles en qualité de l'air. Parmi ceux-ci, notons CHRONOS (Canadian Regional and Hemispheric Ozone and NOx System) (Pudykiewicz et Koziol, 2001), AURAMS (A Unified Regional Air-quality Modelling System) (Moran et al., 1998) et CMAQ (Community Multiscale Air Quality) (Environmental Protection Agency, 2006).

Les équations d'advection utilisées par les modèles Eulériens contiennent généralement des termes non linéaires (Seinfeld et Pandis, 1998). Par conséquent, les équations décrivant l'évolution du vent moyen, ainsi que du champ de concentration moyenne impliquent des termes d'ordre supérieur qui sont difficiles à calculer exactement (Seinfeld et Pandis, 1998). Des approximations, qui ne sont pas forcément uniformément valides, sont généralement utilisées afin de calculer ces termes (Wilson et Sawford, 1996). Il en résulte donc que les équations de diffusion ne sont pas valides près des sources d'émissions (Wilson et Sawford, 1996). Cela peut être gênant pour des applications comme l'étude de la dispersion aux abords des routes. L'impact de ce problème peut être atténué en utilisant une grille avec une résolution plus fine, mais le temps de calcul sera alors plus important.

CHAPITRE 2 : DESCRIPTION DU MODÈLE

La mise au point d'un modèle de dispersion de particules est complexe. Plusieurs forces, qui influencent la trajectoire des particules, doivent être modélisées. Au niveau des algorithmes, de nombreux choix doivent être effectués en tenant compte des particularités des équations à résoudre.

2.1 Choix d'un modèle mathématique

Tout d'abord, il est nécessaire de déterminer le type de modèle mathématique qui sera utilisé. L'application des modèles Eulérien, Gaussien et Lagrangien a été considérée lors de notre étude. Notre choix s'est porté sur un modèle Lagrangien stochastique d'ordre un puisque celui-ci permet de représenter l'état d'une particule virtuelle, à chaque pas de temps, par sa position et sa vitesse indépendamment de la grille sur laquelle sont fournies les données météorologiques (Wilson et Sawford, 1996). La résolution d'un tel modèle est donc arbitrairement élevée. Puisque chaque particule virtuelle est indépendante, il est possible de suivre les particules émises par chacune des sources indépendamment. Par exemple, il est possible de déterminer quelle est la contribution d'une route particulière lorsque l'on modélise un réseau routier.

2.2 Choix d'un modèle pilote

Notre modèle Lagrangien stochastique d'ordre un est de type hors-ligne. Les informations sur l'état de l'atmosphère doivent lui être fournies par un modèle de prévision météorologique. Parmi les modèles existants, le modèle opérationnel du Service Météorologique du Canada GEM (Modèle

Environnemental Multi-échelle) a été utilisé pour le développement et la validation de notre travail (Desgagné et al., 1997). Ce modèle a été choisi en raison de l'accessibilité de son code source et de la qualité de sa documentation. Il serait également possible d'adapter notre modèle pour utiliser un autre modèle de prévision météorologique comme MC2 (Mesoscale Compressible Community Model), MM5 (Fifth-Generation NCAR / Penn State Mesoscale Model) ou ECMWF (European Centre for Medium-Range Weather Forecasts) au lieu de GEM (Desgagné et al., 1997) .

Nous avons aussi choisi de spécifier les données météorologiques aux points d'une grille qui est définie sur une projection polaire stéréographique nord vraie à 60 degrés. Dans ce type de projection, la terre est projetée sur un plan posé à sa surface au pôle Nord. La grille est définie à l'aide des paramètres suivants :

- p_i : position du coin inférieur gauche sur l'axe des X
- p_j : position du coin inférieur gauche sur l'axe des Y
- d_{60} : résolution de la grille, en mètres, à 60 degrés nord de latitude
- d_{grw} : angle de rotation de la grille par rapport au méridien de Greenwich

Étant donné que la déformation engendrée par la projection augmente à mesure que l'on s'éloigne du pôle Nord, ce type de projection n'est approprié que pour des simulations sur des régions dans l'hémisphère nord. Puisque les équations, ainsi que les algorithmes de notre modèle ne dépendent pas d'une projection spécifique, il serait possible de l'adapter afin d'utiliser n'importe quel type de projection. La projection polaire stéréographique a été choisie car son utilisation avec la programmation du Service Météorologique du Canada est bien documentée (RPN, 2006).

Notre modèle requiert quatre champs météorologiques tridimensionnels : les composantes verticales et horizontales de la vitesse du vent, la densité de l'air ρ en kg/m^3 et la température de l'air en degré Kelvin (K). Le modèle météorologique GEM utilise une coordonnée verticale hybride (Desgagné et al., 1997). Les équations paramétriques des fluctuations des vents qui seront utilisées dans ce travail ne sont pas exprimées en coordonnées hybrides, mais elles ont plutôt pour unité des mètres par seconde (Stohl et al., 2005). Afin d'éviter d'avoir à convertir les vitesses d'un système de coordonnées à l'autre à chaque pas de temps, les champs tridimensionnels sont interpolés linéairement des niveaux hybrides du modèle GEM à un système de coordonnées cartésien basé sur la hauteur en mètres au-dessus du niveau du sol. Cette approche est aussi utilisée par le modèle FLEXPART (Stohl et al., 2005). En plus des champs tridimensionnels mentionnés précédemment, notre modèle de dispersion requiert divers paramètres de couche limite qui sont représentés par des champs en deux dimensions. Ces champs sont la hauteur de la couche limite h , la longueur de Monin-Obukhov L , la vitesse de frottement u_* , l'échelle de vitesse verticale convective w_* et la longueur de rugosité z_0 .

2.3 Modélisation de la trajectoire d'une particule virtuelle

Si le champ tridimensionnel du vent fourni par le modèle pilote était complètement spécifié de façon continue pour tous les points de l'espace et pour toute la durée de la simulation, le calcul de la trajectoire d'une particule se résumerait à la résolution de l'équation différentielle ordinaire :

$$\frac{dr}{dt} = (u, v, w) \quad (0.1)$$

où r est la position de la particule dans l'atmosphère, t est le temps et (u, v, w) est la vitesse du vent. Le modèle GEM utilise toutefois des méthodes numériques représentant l'espace et le temps de façon discrète. La vitesse du vent est spécifiée seulement pour certains pas de temps aux points d'une grille. Afin de simuler la trajectoire d'une particule virtuelle, il est nécessaire de pouvoir évaluer précisément sa vitesse tout au long de cette trajectoire. On représente donc la vitesse de déplacement d'une particule à l'aide de la décomposition de Reynolds :

$$(u, v, w) = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) + (u', v', w') \quad (0.2)$$

où $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ est la vitesse d'advection et (u', v', w') est la vitesse de diffusion. Étant donné la position d'une particule virtuelle au temps t , sa position au temps $t + \Delta t$ est obtenue en évaluant l'équation

$$(x, y, z)_{t+\Delta t} = (x, y, z)_t + \int_t^{t+\Delta t} [(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}) + (u', v', w')] dt \quad (0.3)$$

2.3.1 Calcul de la vitesse d'advection

L'advection est définie par l'équation différentielle ordinaire :

$$\frac{dr}{dt} = \bar{V}(r, t) \quad (0.4)$$

où $\bar{V}(r, t)$ est le vecteur de vitesse des vents moyens, r est la position de la particule et t est le temps (D'Amours et al., 2004). La vitesse du vent moyen est fournie par le modèle météorologique GEM à intervalles réguliers selon la

configuration spécifiée par l'utilisateur. Le pas de temps de notre modèle Lagrangien est le même que celui auquel l'information météorologique est fourni par GEM. Le pas de temps est choisi en fonction de la résolution de la grille utilisée et peut varier de quelques minutes à une heure. Pour l'étude de cas présentée au chapitre 3, par exemple, nous avons utilisé une grille à 2.5 km de résolution, ainsi qu'un pas de temps constant de 15 minutes.

2.3.2 Algorithme de résolution de l'équation d'advection

La plupart des modèles utilisent la méthode d'Euler pour intégrer l'équation différentielle (0.4) (D'Amours et al., 2004) (Flesh et al., 2004) (Ryall et Maryon, 1998) (Stohl et al., 2005). Cette méthode consiste à intégrer seulement le premier terme du développement en série de Taylor de l'équation, en négligeant les termes d'ordre supérieurs à Δt^2 (Stoer et Burlish, 2002).

$$r_{t+\Delta t} = r_t + \bar{V}(r,t)\Delta t + O(\Delta t^2) \quad (0.5)$$

Une méthode numérique de résolution d'une équation différentielle ordinaire est dite d'ordre n si son erreur est dans $O(\Delta t^{n+1})$, où Δt est le pas de temps (Press et al., 1992). La méthode d'Euler est d'ordre 1. La méthode d'Euler converge donc vers la bonne solution uniquement lorsque Δt tend vers 0 (Stoer et Burlish, 2002). Par conséquent, si la vitesse ou la direction du vent change le long de la trajectoire d'une particule, l'erreur de calcul associée à cette méthode peut être très grande (Pozrikidis, 2001). Pour palier à ce défaut, nous avons décidé d'utiliser la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (Press et al., 1992). Cette méthode permet de détecter les variations de la vitesse du vent lors de l'intégration de l'équation d'advection (Press et al., 1992). Elle permet donc d'obtenir de bons résultats dans le cas où la vitesse ou la direction du vent

change au cours d'un pas de temps. Notre choix s'est arrêté sur la méthode de Runge-Kutta, plutôt que sur des méthodes plus élaborées, comme la méthode de Bulirsch-Stoer ou les méthodes de prédicteur-correcteur, car ces dernières peuvent être numériquement instable lorsque la fonction à intégrer n'est pas harmonieuse ou lorsqu'elle est évaluée par interpolation des données aux points d'une grille (Press et al., 1992).

La méthode de Runge-Kutta nécessite, dans un premier temps, de calculer la vitesse de la particule, ainsi que trois vitesses en différents points obtenus à l'aide de la méthode d'Euler :

1. v_1 est la vitesse au temps t .
2. v_2 est la vitesse au point situé au temps $t + \Delta t/2$. Ce point est obtenu à l'aide de la méthode d'Euler en utilisant la vitesse v_1 .
3. v_3 est aussi une vitesse en un point au temps $t + \Delta t/2$. Cette fois, le point est obtenu en utilisant la vitesse v_2 .
4. v_4 est la vitesse donnée par la méthode d'Euler au temps $t + \Delta t$ en utilisant la vitesse v_3 .

La vitesse d'advection $\bar{V} = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ est ensuite obtenue en calculant la moyenne pondérée de ces quatre vitesses, en donnant un poids plus grand aux vitesses v_2 et v_3 qui ont été calculées au milieu de l'intervalle.

$$(\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})_{t+\Delta t} = \frac{(v_1 + 2v_2 + 2v_3 + v_4)}{6} \quad (0.6)$$

où

$$\begin{aligned}
 v_1 &= \bar{V}(r_i, t) \\
 v_2 &= \bar{V}\left(r_i + v_1 \frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \\
 v_3 &= \bar{V}\left(r_i + v_2 \frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \\
 v_4 &= \bar{V}(r_i + v_3 \Delta t, t + \Delta t)
 \end{aligned} \tag{0.7}$$

La dernière étape de la méthode de Runge-Kutta classique consiste à calculer le déplacement. Dans le cas de notre modèle, le déplacement d'une particule virtuelle est influencé par la somme de deux forces qui agissent simultanément. Cette étape est effectuée lorsque la vitesse de diffusion est calculée.

2.3.3 Calcul de la vitesse de diffusion et déplacement des particules

La vitesse de diffusion des particules dans l'air (u', v', w') est modélisée à l'aide d'une approche semblable à celle utilisée pour représenter le mouvement Brownien (Rodean, 1996). Le mouvement Brownien est une description des mouvements aléatoires que subit une particule suspendue dans un gaz. Ces mouvements aléatoires sont causés par les fréquentes collisions entre la particule et les molécules du gaz qui l'entourent (Rodean, 1996). En coordonnées Lagrangiennes, le mouvement Brownien est représenté par l'équation de Langevin (Coffey et al., 2004; Rodean, 1996). Deux forces caractérisent l'effet du fluide agissant sur la particule : une force visqueuse de freinage et une force fluctuant de façon aléatoire, représentant les impacts entre la particule et les molécules du fluide (Rodean, 1996). Cette force aléatoire, appelée force de Langevin, est supposée indépendante de la vitesse de

déplacement de la particule au même instant. L'équation de Langevin est une équation différentielle stochastique de second ordre de la forme suivante (Rodean, 1996):

$$\begin{aligned} dr &= v' dt \\ dv' &= a(r, v', t) dt + b(r, v', t) \xi(t) dt \end{aligned} \quad (0.8)$$

où r et v' sont respectivement la position et la vitesse de la particule, a est un coefficient d'amortissement causé par la friction avec le fluide environnant et b est un coefficient réel. La force de Langevin est le processus stochastique $\xi(t)$. Celui-ci suit une loi normale de moyenne 0 et de variance dt .

Dans le contexte de la dispersion atmosphérique, une particule est un petit élément du fluide dont on calcule la trajectoire. Ainsi, la diffusion atmosphérique des particules virtuelles se produit à un ordre de grandeur plus grand que le mouvement Brownien. La principale difficulté dans la formulation d'un modèle Lagrangien stochastique est de déterminer des coefficients a et b qui soient appropriés pour représenter la turbulence de l'atmosphère (Wilson et Sawford, 1996).

Dans la verticale en particulier, il est nécessaire de choisir une équation qui respecte le critère de Thomson (Thomson, 1987) (Rodean, 1996).

Critère de Thomson

Si les particules sont initialement mélangées uniformément (en terme de position et de vitesse) dans un fluide turbulent, elles doivent le demeurer (Rodean, 1996).

Le fait d'imposer ce critère ne signifie pas que la solution de l'équation de Langevin soit restreinte au cas où les particules sont bien mélangées. Ce critère sert plutôt à assurer que cette solution soit possible. De plus, lorsque l'atmosphère est instable et qu'il y a un fort gradient dans la variance de la vitesse de diffusion verticale, ce critère permet de s'assurer que les particules ne s'accumulent pas dans les endroits où la variance de la vitesse de diffusion est plus petite.

Dans notre modèle, le déplacement des particules induit par la diffusion atmosphérique est défini par les équations de Langevin décrites par Stohl et al. (2005). Dans ces équations, la géométrie qui est utilisée afin de décrire les perturbations du vent horizontal est particulière. En effet, l'axe des x est orienté selon la direction du vent moyen et l'axe des y lui est perpendiculaire. Cette perturbation devra être transformée dans le système de coordonnées de la grille afin de calculer la trajectoire des particules virtuelles.

- Déplacement horizontal

$$\begin{aligned} dx &= u' dt \\ du' &= -\frac{u'}{\tau_{u'}} dt + \sqrt{\frac{2\sigma_{u'}^2}{\tau_{u'}}} \xi(t) dt \end{aligned} \quad (0.9)$$

et

$$\begin{aligned} dy &= v' dt \\ dv' &= -\frac{v'}{\tau_{v'}} dt + \sqrt{\frac{2\sigma_{v'}^2}{\tau_{v'}}} \xi(t) dt \end{aligned} \quad (0.10)$$

Dans la verticale, l'axe des z est le même que celui que nous avons utilisé pour le calcul de la vitesse d'advection.

- Déplacement vertical

$$dz = w' dt$$

$$d\left(\frac{w'}{\sigma_{w'}}\right) = -\frac{w'}{\sigma_{w'}} \frac{dt}{\tau_{w'}} + \frac{\partial \sigma_{w'}}{\partial z} dt + \frac{\sigma_{w'}}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} dt + \sqrt{\frac{2}{\tau_{w'}}} \xi(t) dt \quad (0.11)$$

Dans ces équations, les variables $(\sigma_{u'}, \sigma_{v'}, \sigma_{w'})$ et $(\tau_{u'}, \tau_{v'}, \tau_{w'})$ sont respectivement l'écart-type des fluctuations et le temps de corrélation (Rodean, 1996). Ces équations de Langevin sont utilisées par le modèle FLEXPART. Nous les avons choisies, à la suite de notre revue de la littérature, parce que Stohl et Thomson (1999) ont démontré que l'équation (0.11) respecte le critère de Thomson, même lorsque l'intensité de la turbulence varie selon l'altitude. De plus, l'équation (0.11) tient compte de la variation de la densité de l'air ρ avec l'altitude.

L'écart-type de la vitesse de fluctuation, ainsi que le temps de corrélation sont évalués à l'aide de la théorie de la similarité de Monin-Obukhov en fonction de la stabilité de l'atmosphère, des paramètres de la couche limite h , L , u_* , w_* , z_0 et de la force de Coriolis f (Hanna, 1981; Ryall et Maryon, 1998; Stohl et al., 2005). La stabilité de l'atmosphère est déterminée en examinant la valeur du rapport de la hauteur de la particule sur la longueur de Monin-Obukhov z/L (Stohl et al., 2005; Rodean, 1996). Si ce rapport est positif, l'atmosphère est stable. S'il est négatif, elle est instable. Une valeur de 0 correspond à une atmosphère neutre (Jacobson, 2005). Lorsque l'atmosphère est stable, l'écart-type de la vitesse de fluctuation et le temps de corrélation sont donnés par les équations suivantes :

$$\sigma_{u'} = 2u_* \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (0.12)$$

$$\sigma_{v'} = \sigma_{w'} = 1.3u_* \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (0.13)$$

$$\tau_{u'} = 0.15 \frac{h}{\sigma_{u'}} \sqrt{\frac{z}{h}} \quad (0.14)$$

$$\tau_{v'} = 0.07 \frac{h}{\sigma_{v'}} \sqrt{\frac{z}{h}} \quad (0.15)$$

$$\tau_{w'} = 0.1 \frac{h}{\sigma_{w'}} \sqrt{\frac{z}{h}} \quad (0.16)$$

Par contre, lorsque les conditions sont instables, l'écart-type de la vitesse de fluctuation est proportionnel à l'échelle de vitesse verticale convective w_* . Il est aussi nécessaire de tenir compte de la longueur de rugosité z_0 dans le calcul du temps de corrélation.

$$\sigma_{u'} = \sigma_{v'} = u_* \left(12 + \frac{h}{2L}\right)^{1/3} \quad (0.17)$$

$$\sigma_{w'} = w_* \sqrt{1.2 \left(1 - 0.9 \frac{z}{h}\right) \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} + \left(1.8 - 1.4 \frac{z}{h}\right) u_*^2} \quad (0.18)$$

$$\tau_{u'} = \tau_{v'} = 0.15 \frac{h}{\sigma_{u'}} \quad (0.19)$$

$$\tau_{w'} = \begin{cases} 0.1 \frac{z}{\sigma_{w'} \left[0.55 - 0.38 \frac{(z - z_0)}{L} \right]} & \text{si } z < |L| \\ 0.59 \frac{z}{\sigma_{w'}} & \text{si } \frac{z}{h} < 0.1 \\ 0.15 \frac{z}{\sigma_{w'}} \left[1 - \exp\left(\frac{-5z}{h}\right) \right] & \text{sinon} \end{cases} \quad (0.20)$$

Finalement, lorsque les conditions sont neutres, on aura

$$\sigma_{u'} = 2u_* \exp\left(\frac{-3fz}{u_*}\right) \quad (0.21)$$

$$\sigma_{v'} = \sigma_{w'} = 1.3u_* \exp\left(\frac{-2fz}{u_*}\right) \quad (0.22)$$

$$\tau_{u'} = \tau_{v'} = \tau_{w'} = \frac{0.5z/\sigma_{w'}}{1 + 15fz/u_*} \quad (0.23)$$

2.3.4 Algorithme de résolution de l'équation de diffusion et déplacement de la particule

La méthode d'Euler, qui permet d'évaluer de façon approximative la solution d'une équation de Langevin, est utilisée par plusieurs modèles dont MLDP0 (D'Amours et al., 2004), MLDP1 (Flesh et al., 2004), MLCD (Flesh et al., 2002) et NAME (Ryall et Maryon, 1998). La solution de l'équation de Langevin (0.8) obtenue à l'aide de la méthode d'Euler est

$$\begin{aligned} r_{t+\Delta t} &= r_t + v' \Delta t \\ v'_{t+\Delta t} &= v'_t + a(r_t, v'_t) \Delta t + b(r_t, v'_t) \sqrt{\Delta t} R \end{aligned} \quad (0.24)$$

où R est une variable aléatoire dont la distribution suit une loi normale centrée réduite $N(0,1)$. Cette méthode calcule une approximation qui tend vers la solution de l'équation de Langevin lorsque $\Delta t \rightarrow 0$. Puisque cette méthode nécessite un pas de temps très petit, le temps de calcul peut être très grand. (Wilson et Sawford, 1996 ; Schwere et al., 2002). Dans le modèle FLEXPART, l'algorithme d'Euler est utilisé pour intégrer les équations horizontales (2.9) et (2.10) (Stohl et al., 2005). Dans la verticale, cette méthode est utilisée seulement lorsque $\Delta t < 0.5\tau_w$. Lorsque le pas de temps est plus grand, la méthode suivante est utilisée pour résoudre l'équation (0.11)

$$\left(\frac{w}{\sigma_w} \right)_{t+\Delta t} = r_w \left(\frac{w}{\sigma_w} \right)_t + \frac{\partial \sigma_w}{\partial z} \tau_w (1 - r_w) + \frac{\sigma_w}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \tau_w (1 - r_w) + \sqrt{1 - r_w^2} R \quad (0.25)$$

où $r_w = \exp(-\Delta t / \tau_w)$ est l'autocorrélation du vent vertical (Stohl et al., 2005). Cette dernière méthode, développée par Ermak, est fréquemment utilisée pour la simulation des liquides (Allen et Tildesley, 1987).

Pour satisfaire le critère de Thomson, il faut que la fonction de densité de la hauteur z et de la vitesse w' soit de la forme

$$P(z, w') = N \exp\left(\frac{-w'^2}{2\sigma_{w'}^2}\right) \quad (0.26)$$

où N est une constante de normalisation (Stohl et Thomson, 1999). Par contre, lorsque l'on résout cette équation numériquement, une erreur est

systématiquement introduite parce que l'équation différentielle est remplacée par une équation aux différences finies (Batrouni et al, 1985). Plus précisément, en discrétisant le temps par une série de pas de temps de taille fixe Δt , on obtient une méthode numérique de la forme

$$z_{t+\Delta t} = z_t + W(z, \xi) \Delta t \quad (0.27)$$

dont la fonction de densité P_{sim} peut s'écrire comme

$$P_{sim}(z, w') = P(z, w') \times \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{S_n \times \Delta t^n}{2\sigma_{w'}^2}\right) \quad (0.28)$$

(Batrouni et al, 1985) (Mannella, 2006). On définit l'ordre d'une méthode numérique comme étant le plus petit entier n tel que $S_{n+1} \neq 0$ dans l'équation (0.28). Si $S_1 \neq 0$, alors la méthode est d'ordre 0. Selon cette définition, plus l'ordre d'une méthode numérique est élevé, plus sa fonction de densité se rapproche de celle de l'équation de Langevin. Les méthodes d'Euler et d'Ermak sont respectivement d'ordre 0 et 1 (Mannella, 2004) (Mannella, 2006).

L'erreur associée aux méthodes d'Euler et d'Ermak est fonction de $\tau_{w'}$. Mannella (2004, 2006) a donc proposé un nouvel algorithme d'ordre 1 dont l'erreur est indépendante de $\tau_{w'}$. Cet algorithme est basé sur la méthode saute-mouton, dans laquelle la vitesse et la position sont calculées en alternance. Mannella (2004) a modifié la méthode saute-mouton, en ajoutant des coefficients qui annulent les termes S_1 dans la fonction de densité de la solution. On obtient ainsi une méthode d'ordre 1. De plus, l'erreur associée à cette méthode est indépendante de $1/\tau_{w'}$ (Burrage et al., 2005). Dans notre modèle,

nous utilisons cet algorithme afin de résoudre les équations (0.9), (2.10), et (2.11).

Pour résoudre l'équation de Langevin, il faut utiliser un pas de temps $\Delta\tilde{t}$ beaucoup plus petit que le pas de temps Δt qui est utilisé pour le calcul de la vitesse d'advection¹. Cela est nécessaire, car l'intensité et la direction des perturbations peuvent varier en fonction du temps de façon beaucoup plus rapide que dans le cas du vent moyen. De plus, l'équation (0.11) n'est valide que pour des valeurs de $\Delta\tilde{t}$ beaucoup plus petite que τ_w . Chacun des petits pas de temps $\Delta\tilde{t}$ est défini par la relation

$$\Delta\tilde{t} = \varepsilon \tau_w, \quad (0.29)$$

où ε est un nombre réel beaucoup plus petit que 1 (Ryall et Maryon, 1998). Ryall et Maryon (1998) recommandent d'utiliser une valeur de ε entre 0.05 et 0.1.

Pour chacun de ces petits pas de temps, la vitesse d'advection est considérée comme étant constante. La somme des vitesses d'advection et de diffusion permet de calculer le déplacement des particules sur chacun de ces intervalles de temps.

Sur l'axe des x , la procédure permettant de déterminer le déplacement d'une particule est donc :

1. calcul de la position à la moitié de l'intervalle : $\tilde{x} = x_t + \frac{\Delta\tilde{t}}{2}(\bar{u}_{t+\Delta t} + u'_t)$

¹ Rappelons que le pas de temps d'advection est le même que le pas de temps de sortie du modèle pilote.

2. calcul des paramètres $\sigma_{u'}$ et $\tau_{u'}$ à la position $\tilde{x}$ à l'aide des équations (2.12) à (2.23).
3. calcul des coefficients $c_1 = 1 - \frac{\Delta \tilde{t}}{2\tau_{u'}}$ et $c_2 = \left(1 + \frac{\Delta \tilde{t}}{2\tau_{u'}}\right)^{-1}$
4. mise à jour de la vitesse : $u'_{t+\Delta \tilde{t}} = c_2 \left[c_1 u'_t + \sigma_{u'} \sqrt{\frac{2\Delta \tilde{t}}{\tau_{u'}}} R \right]$, où $R \sim N(0,1)$
5. transformation dans le système de coordonnées de la grille :

$$\hat{u} = u'_{t+\Delta \tilde{t}} \left(\bar{u}_{t+\Delta t}^2 / \sqrt{\bar{u}_{t+\Delta t}^2 + \bar{v}_{t+\Delta t}^2} \right)$$
6. mise à jour de la position : $\tilde{x}_{t+\Delta \tilde{t}} = \tilde{x} + \frac{\Delta \tilde{t}}{2} (\bar{u}_{t+\Delta t} + \hat{u})$, où $\bar{u}_{t+\Delta t}$ est la vitesse du vent moyen obtenue par la méthode de Runge-Kutta.

Sur l'axe des y , on utilise exactement la même procédure, en remplaçant x par y , $\bar{u}$ par $\bar{v}$ et u' par v' . La transformation dans le système de coordonnées de la grille est alors donnée par l'équation $\hat{v} = v'_{t+\Delta \tilde{t}} \left(\bar{v}_{t+\Delta t}^2 / \sqrt{\bar{u}_{t+\Delta t}^2 + \bar{v}_{t+\Delta t}^2} \right)$.

Dans la verticale, l'équation de Langevin est plus complexe :

1. calcul de la position à la moitié de l'intervalle $\tilde{z} = z_t + \frac{\Delta \tilde{t}}{2} (\bar{w}_{t+\Delta t} + w'_t)$
2. calcul des paramètres $\sigma_{w'}$, $\tau_{w'}$, de la densité de l'air ρ et de sa dérivée partielle $\frac{\partial \rho}{\partial z}$ à la position $\tilde{z}$ à l'aide des équations (2.12) à (2.23).
3. calcul des coefficients $c_1 = 1 - \frac{\Delta \tilde{t}}{2\tau_{w'}}$ et $c_2 = \left(1 + \frac{\Delta \tilde{t}}{2\tau_{w'}}\right)^{-1}$

4. mise à jour de la vitesse :

$$w'_{t+\Delta\tilde{t}} = \sigma_{w'} \left[c_2 \left(c_1 \frac{w'_t}{\sigma_{w'}} + \left(\frac{\partial \sigma_{w'}}{\partial z} + \frac{\sigma_{w'}}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z} \right) \Delta\tilde{t} + \sqrt{\frac{2\Delta\tilde{t}}{\tau_{w'}}} R \right) \right], \text{ où } R \sim N(0,1)$$

5. mise à jour de la position : $z_{t+\Delta\tilde{t}} = \tilde{z} + \frac{\Delta\tilde{t}}{2} (\bar{w}_{t+\Delta t} + w'_{t+\Delta\tilde{t}})$, où $\bar{w}_{t+\Delta t}$ est la vitesse du vent vertical moyen obtenue par la méthode de Runge.

La position intermédiaire $\hat{z}$, ainsi que la position finale $z_{t+\Delta\tilde{t}}$ peuvent potentiellement se trouver en dehors des frontières de la couche limite. Afin de conserver les particules virtuelles à l'intérieur de la couche limite, il est donc important de tenir compte des frontières du domaine lors du calcul des étapes 1 et 5.

2.4 Conditions frontières et initiales

2.4.1 Problèmes aux frontières de la couche limite

Le domaine sur lequel la simulation du transport des particules virtuelles est faite est un espace géométrique fini. Horizontalement, il est limité par les pourtours de la grille sur laquelle sont fournies les informations météorologiques. Les particules virtuelles, qui sont rangées dans une structure de données de vecteur, sont supprimées lorsqu'elles sortent du domaine horizontal. La mémoire qui est associée à chacune des particules supprimées est alors libérée. Le principal désavantage de cette méthode vient du fait qu'une particule pourrait sortir temporairement du domaine horizontal et y revenir en raison d'un changement dans la direction des vents ou encore à cause de l'effet de la diffusion. Puisque nous ne disposons d'aucune information météorologique à l'extérieur du domaine horizontal, ce cas est difficile à traiter. Il

est néanmoins possible de réduire les possibilités que cela se produise dans une région d'intérêt en utilisant une grille météorologique plus grande que la région sur laquelle on désire étudier la dispersion des particules.

Dans la verticale, les frontières sont la surface du sol et de l'eau, ainsi que le sommet de la couche limite. Pour modéliser le comportement des particules près de la surface et au sommet de la couche limite, nous avons utilisé l'approche proposée par Wilson et Flesch (1993). Cette méthode est aussi utilisée par les modèles MLDP1 (Flesh et al., 2004) et MLCD (Flesh et al., 2002).

Lorsqu'une particule tente de se déplacer en un point z_+ , situé au-dessus de la hauteur de la couche limite h elle rebondie pour atteindre une position z_- située à l'intérieur de la couche limite.

$$z_- = 2h - z_+ \quad w'_- = -w'_+ \quad (0.30)$$

La hauteur de la couche limite peut varier en fonction du temps et des conditions météorologique, plusieurs particules peuvent alors se trouver en dehors de la couche limite. On permet alors aux particules de rester au dessus de h . Les particules qui sont au dessus de h sont déplacées uniquement par les vents géostrophiques.

La surface du sol et de l'eau forme une frontière complexe puisque des particules peuvent s'y déposer (Rodean, 1996). Dans un premier temps, on défini une hauteur de réflexion z_r , près de la surface. La hauteur de réflexion doit être au minimum à une distance de l'ordre de z_0 (Wilson et Flesch, 1993). Lorsque la trajectoire d'une particule virtuelle passe par un point z_- , situé sous

la hauteur de réflexion z_r , elle rebondit pour atteindre un point z_+ . La vitesse de déplacement de la particule virtuelle est inversée et la nouvelle position est alors donnée par :

$$z_+ = 2z_r - z_- \quad w'_+ = -w'_- \quad (0.31)$$

Une particule réelle qui descend sous z_r y passe un temps τ^* avant d'émerger à nouveau au dessus de z_r . Pendant ce temps, elle parcourt horizontalement une distance δ^* . Wilson et al. (2001) propose la formule suivante afin de calculer le temps moyen de résidence d'une particule virtuelle sous la surface de réflexion en fonction de la vitesse de friction u_* :

$$\langle \tau^* \rangle = 2 \frac{z_r}{u_*} \quad (0.32)$$

La distance moyenne parcourue sous z_r est donnée par $\langle \delta^* \rangle = \langle \tau^* \rangle \times \langle U|z_r \rangle$, où $\langle U|z_r \rangle$ est la vitesse moyenne du vent sous z_r . La vitesse moyenne du vent sous z_r est donnée par

$$\begin{aligned} \langle U|z_r \rangle &= \frac{1}{z_r} \int_{z=0}^{z_r} U(z) dz \\ &= \begin{cases} 0.3u_* \frac{z_0}{z_r} \left[\exp\left(0.33 \frac{z_r}{z_0}\right) - 1 \right] & \text{si } z_r < 10z_0 \\ 2.5 \frac{u_*}{z_r} [(z_r - 7z_0) \ln(z_r - 7z_0) - 3z_0 \ln(3z_0) + (10z_0 - z_r)(1 + \ln(z_0)) + 3.2z_0] & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned} \quad (0.33)$$

2.4.2 Dépôt sec des particules

Pendant la période de temps que les particules passent sous la hauteur de réflexion z_r , elles peuvent entrer en contact avec les éléments qui se trouvent à la surface du sol ou de l'eau et y adhérer. Si la masse d'une particule virtuelle avant la réflexion est M_0 , sa masse sera réduite d'un facteur R après la réflexion.

$$M = RM_0 \quad (0.34)$$

Le facteur R correspond donc à la probabilité qu'une particule qui entre en contact avec la surface soit réfléchi. Wilson et al. (1989) ont montrés que cette probabilité de réflexion peut être calculée en fonction de la vitesse de dépôt sec V_d :

$$R = \left(1 - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{V_d}{\sigma_{w'}} \right) / \left(1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{V_d}{\sigma_{w'}} \right) \quad (0.35)$$

Dans notre modèle, la vitesse de dépôt sec est calculée à l'aide de la méthode des résistances (Seinfeld et Pandis, 1998 ; Zhang et al., 2001 ; Jacobson, 2005). Par analogie, la vitesse de dépôt sec V_d d'une particule peut être considérée en terme de résistances électriques comme la réciproque de trois résistances en série (R_a , R_b et $R_a R_c V_s$) et d'une autre en parallèle ($1/V_s$) (Seinfeld et Pandis, 1998)

$$V_d = [R_a + R_b + R_a R_b V_s]^{-1} + V_s \quad (0.36)$$

Dans l'équation (0.36), R_a est la résistance aérodynamique, R_b est la résistance de la couche quasilaminaire et V_s est la vitesse de sédimentation. La résistance aérodynamique est causée par la turbulence de l'atmosphère (Seinfeld et Pandis, 1998 ; Zhang et al., 2001 ; Jacobson, 2005). Cette turbulence agit comme une force de résistance qui ralentit la chute de la particule. L'intensité de cette résistance dépend de la stabilité de l'atmosphère. La résistance de la couche quasilaminaire est due à une couche près de la surface dans laquelle il y a très peu de turbulence. Les particules peuvent traverser cette couche uniquement par diffusion. Cette résistance est donc une résistance à la diffusion moléculaire. La théorie de la similarité de Monin-Obukhov permet d'exprimer la valeur des résistances R_a et R_b en fonction de la vitesse de friction u_* (Jacobson, 2005). Celle-ci prend généralement de grandes valeurs lorsque la couche de surface est fortement turbulente (Jacobson, 2005). Dans de telles conditions, la résistance est petite et la vitesse de dépôt sec est grande. La présence de végétation n'est pas prise en compte dans le calcul des résistances, car nous ne disposons pas d'information précise sur l'utilisation du terrain.

La résistance aérodynamique R_a est évaluée à l'aide de l'équation

$$R_a \approx \frac{1}{ku_*} \left[\ln \left(\frac{z_r}{z_0} \right) - \Psi_h \left(\frac{z_r}{L} \right) + \Psi_h \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \quad (0.37)$$

où $k = 0.40$ est la constante de von Karman, z_r est la hauteur à laquelle la vitesse de dépôt sec est calculée, z_0 est la longueur de rugosité et L est la longueur de Monin-Obukhov (Stull, 1988 ; Stohl et al., 2005). La fonction Ψ_h est

une correction qui varie selon la stabilité de l'atmosphère (Paulson, 1970 ; Beljaars et Holtslang, 1991).

La relation entre la résistance de la couche quasilaminaire R_b et la diffusion moléculaire est exprimée par le rapport des nombres de Schmidt $Sc = \nu/D$ et de Prandtl Pr . Le nombre de Schmidt est défini comme le rapport entre la viscosité cinématique de l'air ν et le coefficient de diffusion moléculaire de la particule D . Le nombre de Prandtl, quant à lui, est le rapport entre la viscosité cinématique et la diffusivité thermique. Le nombre de Prandtl vaut typiquement autour de 0.95 dans l'atmosphère. La résistance quasilaminaire est calculée à l'aide de l'équation (Seinfeld et Pandis, 1998; Stohl et al., 2005)

$$R_b = \frac{2}{ku_*} \left(\frac{Sc}{Pr} \right)^{2/3} \quad (0.38)$$

La vitesse de sédimentation résulte de l'action combinée de la force de gravité et d'une force en direction opposée due à la viscosité de l'air. Celle-ci est donnée par l'équation (Zhang et al., 2001; Jacobson, 2005) :

$$V_s = \frac{d^2 \rho_p g}{18 \eta_a} G \quad (0.39)$$

où d est le diamètre de la particule, ρ_p est la densité de la particule, g est l'accélération due à la force de gravité, η_a est la viscosité dynamique de l'air et G est la correction de Cunningham (Jacobson, 2005). La correction de Cunningham est donnée par l'équation :

$$G = 1 + \frac{2\lambda}{\rho_p} \left(1.257 + 0.4e^{-0.55\frac{\rho_p}{\lambda}} \right) \quad (0.40)$$

où λ est le parcours moyen d'une molécule d'air (Jacobson, 2005). Le parcours moyen d'une molécule d'air est calculé en fonction de la température, de la pression et de la viscosité cinématique de l'air (Seinfeld et Pandis, 1998 ; Zhang et al., 2001).

La vitesse de dépôt sec est fortement influencée par la taille des particules (Jacobson, 2005). Plus la taille de la particule est petite, plus l'importance des résistances aérodynamique et quasilaminaire dans le calcul de la vitesse de dépôt sec est grande. La gravité n'a, quant à elle, qu'une influence secondaire. À l'inverse, plus la taille d'une particule est grande, plus la vitesse de dépôt sec est dominée par la gravité. Le diamètre moyen des particules est un paramètre qui est fourni au modèle par l'utilisateur.

2.4.3 Modélisation des sources d'émissions

Au début de la simulation, la source d'émission doit être modélisée convenablement. En effet, des études de comparaisons de modèles Lagrangiens avec des observations, comme celle de Ménard et D'Amour (2000), ont montré qu'il est important de bien définir les caractéristiques de la source émettrice. Deux types de sources peuvent être représentés dans notre modèle : des sources ponctuelles et des sources linéaires. Les sources ponctuelles représentent une source d'émission, d'un certain diamètre, située en un point géographique précis. Les sources linéaires, quant à elles, servent principalement à représenter des routes.

La représentation d'une source ponctuelle dans notre modèle est basée sur l'approche du modèle MLCD (Modèle Lagrangien Courte Distance) (Flesh et al., 2002). Les particules virtuelles sont émises à l'intérieur d'une colonne verticale de forme cylindrique. La hauteur de cette colonne, son rayon, ainsi que sa position par rapport au sol sont fournis par l'utilisateur. Les particules y sont distribuées uniformément de façon aléatoire (Flesh et al., 2002). Étant donné un cylindre de rayon R , de hauteur h et dont la base est située à une hauteur z par rapport au sol, la position initiale d'une particule virtuelle lors de son émission est donnée par :

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{r_1} R \cos \theta \\y &= \sqrt{r_1} R \sin \theta \\z &= r_2(h - z) + z\end{aligned}\tag{0.41}$$

où $r_1 \in [0,1]$, $r_2 \in [0,1]$ et $\theta \in [0,2\pi]$ sont des variables aléatoires suivant une distribution uniforme (Weisstein, 2005). Si la vitesse de déplacement initiale des particules est connue, par exemple la vitesse d'éjection de la fumée d'une cheminée d'usine, celle-ci peut être fournie par l'utilisateur. Dans le cas contraire, la vitesse initiale des particules virtuelles est nulle. Les heures de début et de fin du relâchement sont spécifiées par l'utilisateur. L'heure à laquelle chacune des particules virtuelles seront relâchées est choisie de façon aléatoire et uniformément durant cette période (Flesh et al., 2002). La masse totale de polluants relâchés, ainsi que le nombre de particules virtuelles sont spécifiés par l'utilisateur. La masse individuelle d'une particule virtuelle est égale à la masse totale divisée par le nombre de particules virtuelles.

Dans le cas des sources linéaires, une description du réseau routier en format *shapefile* doit être fournie par l'utilisateur. Le format de fichier *shapefile*,

développé par la firme ESRI, est couramment utilisé en géomatique afin de représenter des données vectorielles d'objets géométriques (comme des points, des lignes ou des polygones), leurs positions ainsi que leurs attributs (ESRI, 1998). Un réseau routier y est donc représenté par un graphe composé d'une série de sommets, reliés par un ou plusieurs segments de droite. Une route particulière peut être composée de plusieurs segments si sa forme est courbée en certains endroits. Au besoin, ces segments peuvent partager la même valeur pour un certain attribut (le nom de la rue par exemple) afin de représenter leur appartenance à la même route. Les concentrations de polluants émis sur chacun des arcs de ce graphe sont représentées par un attribut associé à cet arc. Le nombre de particules virtuelles à émettre par kilomètre de routes doit être spécifié par l'utilisateur. La position initiale d'une particule sur un segment de droite reliant les sommets $S_1 = (x_1, y_1)$ et $S_2 = (x_2, y_2)$ est obtenue à l'aide de la combinaison convexe :

$$\begin{aligned} x &= x_1 + \alpha(y_1 - x_1) \\ y &= x_2 + \alpha(y_2 - x_2) \end{aligned} \tag{0.42}$$

où $\alpha \in [0,1)$ est une variable aléatoire distribuée uniformément. Étant donné que le type de véhicule utilisé pour produire les données d'émissions peut varier d'un scénario de simulation à l'autre, la hauteur d'émission est un paramètre fourni par l'utilisateur. Cette hauteur d'émission correspond à la hauteur moyenne de l'éjection des gaz des véhicules routiers. Comme dans le cas des sources ponctuelles, le temps d'émission de chacune des particules virtuelles est choisi de façon aléatoire uniformément durant la période de relâchement spécifiée par l'utilisateur.

2.5 Calcul des concentrations

La méthodologie, que nous avons utilisée afin de calculer les concentrations des particules en des lieux géographiques et des moments donnés, est basée sur celle employée par les modèles MLDP0 et MLDP1² (Flesh et al., 2004). Un volume récepteur de forme cylindrique est placé autour de chacun de ces points. Pour chacun des volumes récepteurs, la concentration volumique moyenne $c(x, y, z)$ est calculée à partir du nombre de particules N qu'il contient :

$$c(x, y, z) = \frac{1}{V} N \sum_{i=1}^N m_i \quad (0.43)$$

où m_i est la masse de la $i^{\text{ème}}$ particule, V est le volume du cylindre récepteur. Le diamètre et la hauteur du cylindre récepteur doivent être spécifiés par l'utilisateur. Le choix de ces deux paramètres est important, puisqu'il influence la précision des concentrations qui sont rapportées (Flesh et al., 2004). Étant donné un cylindre récepteur de volume V et un ensemble total de N particules virtuelles, on définit sa capacité minimale de prévision $c_{\min}$ par :

$$c_{\min} = \frac{1}{V} \min(m_j), \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (0.44)$$

La capacité minimale de prévision correspond donc au cas où seule la particule virtuelle ayant la plus petite masse se trouve dans le volume récepteur. La

² Notre outil de calcul des concentrations est basé sur le code développé par R  al D'Amours (Service M  t  orologique du Canada, Division des urgences environnementales) pour les mod  les MLDP0 et MLCD.

capacité minimale de prévision varie de façon inversement proportionnelle au volume du récepteur. De manière générale, le choix d'un petit volume permet une mesure à petite échelle près d'un point donné, alors qu'un volume plus grand donne un aperçu plus grossier de la concentration moyenne aux alentours de ce point. Idéalement, le volume du récepteur devrait être le plus petit possible et le nombre de particules virtuelles devrait être très grand. En pratique, le choix des différents paramètres est un compromis entre la précision de la prévision et le temps de calcul.

Nous avons établi trois critères afin de nous guider dans le choix d'un volume récepteur. Le premier nous donne une borne inférieure sur le diamètre du volume récepteur, soit la résolution de la grille du modèle météorologique. En effet, la précision des données météorologiques est influencée en grande partie par la résolution de cette grille. Puisque les valeurs des champs entre les points sont obtenues par interpolation, il y a une certaine incertitude concernant la trajectoire exacte des particules lorsqu'elles ne sont pas dans un voisinage rapproché d'un des points de la grille. De cette façon, l'homogénéisation permet de compenser partiellement pour les imprécisions dans les données météorologiques. Le second critère permet de déterminer une borne supérieure raisonnable pour le diamètre du récepteur lorsque celui-ci est placé à la position d'une station de mesure. Ce critère est basé sur la représentativité spatiale des stations. À titre indicatif, la représentativité des stations urbaines, suburbaines et rurales sont typiquement autour de 3 km, 30 km et 100 km respectivement (Bouchet, 2006). Le calcul des concentrations volumiques sur un tel volume revient donc, d'une certaine façon, à calculer une valeur moyenne sur un espace relativement homogène. Finalement, le troisième critère nous enjoint à choisir un petit volume lorsque le récepteur est très près de la source et un volume plus grand lorsque ce dernier en est très éloigné. Si la simulation implique un transport de particules sur une très grande distance (par exemple

sur plusieurs centaines de kilomètres), l'erreur accumulée tout au long de la trajectoire des particules peut devenir très grande. Un grand volume récepteur permet d'obtenir une concentration moyennée sur un volume plus grand et donc de tenir compte de cette augmentation de l'incertitude. À l'opposé, un grand récepteur situé très près de la source risque de ne pas mesurer correctement les concentrations. Il convient alors de choisir un volume plus petit. La hauteur du volume récepteur peut être choisie à l'aide de critères semblable, en considérant la résolution verticale du modèle pilote, les caractéristiques des stations de mesures ou encore la position du volume récepteur par rapport à la source.

2.5.1 Comparaison avec les autres modèles Lagrangiens stochastiques d'ordre un

Les principaux modèles Lagrangiens stochastiques d'ordre un qui ont servi de référence à notre travail sont le modèle anglais NAME (Nuclear Accident Model) (Ryall et Maryon, 1998), le modèle européen FLEXPART (Stohl et al., 2005), ainsi que le modèle canadien MLDP1 (Modèle Lagrangien de Dispersion de Particules d'ordre un) (Flesh et al., 2004). Ces modèles ont tous été développés afin de répondre à des urgences comme des accidents nucléaires, et ont été évalués, en les comparant avec des mesures, sur un grand nombre de cas.

Dans le modèle NAME, l'équation de Langevin développée par Thomson (1997) est résolue à l'aide de la méthode d'Euler. Le modèle FLEXPART, quant à lui, offre le choix entre les équations proposées par Legg et Raupach (1982), et Stohl et Thomson (1999). L'équation de Legg et Raupach (1982) ne satisfait pas le critère de Thomson lorsque l'atmosphère est fortement instable, mais Stohl et al. (2005) affirme qu'elle est plus stable numériquement

lorsque le pas de temps de diffusion est grand. Cette équation est résolue avec la méthode d'Euler. L'équation développée par Sthol et Thomson (1999), quant à elle respecte le critère de Thomson et tient compte de la variation de la densité de l'air selon l'altitude. Pour résoudre l'équation de Sthol et Thomson (1999), le modèle FLEXPART utilise la méthode d'Ermak. Finalement, le modèle MLDP1 est basé sur l'équation de Langevin développée par Flesch et al. (2004). Dans cette approche, les paramètres de l'équation de Langevin sont calculés à partir de l'énergie cinétique turbulente, plutôt qu'avec l'aide de la théorie de la similarité de Monin-Obukhov comme c'est le cas pour les deux autres modèles (Flesch et al., 2004). La méthode d'Euler est utilisée pour résoudre l'équation de Langevin dans MLDP1.

Dans notre modèle, nous utilisons les équations de Langevin développés par Sthol et Thomson (1999). Comme FLEXPART, le paramétrage est basé sur la théorie de la similarité de Monin-Obukhov. Cette approche a été choisie car elle est bien documentée dans la littérature scientifique. La principale contribution de ce travail est l'utilisation de l'algorithme de Mannella pour la résolution de l'équation de Langevin. Cette méthode est plus précise que la méthode d'Euler et est plus stable que celle d'Ermak lorsque l'échelle de temps lagrangienne est très grande.

Les conditions que nous avons imposées aux frontières de la couche limite sont basées sur les travaux de Wilson et al. (2001). Cette approche est aussi utilisée par le modèle MLDP1. La principale différence entre notre implantation et celle de MLDP1 concerne la vitesse de dépôt sec. Dans MLDP1, la vitesse de dépôt sec est un paramètre fourni par l'utilisateur au début de la simulation. Dans notre modèle, la vitesse de dépôt sec est calculée en fonction des caractéristiques de la surface, des conditions atmosphériques et de la taille moyenne des aérosols.

CHAPITRE 3 : ÉVALUATION DU MODÈLE

Dans ce chapitre, nous présenterons diverses expériences réalisées avec notre modèle dans le but d'évaluer les performances des simulations. Dans un premier temps, nous vérifierons séparément certaines composantes du modèle décrites au chapitre 2 afin de nous assurer que les différents algorithmes qui les composent donnent les résultats escomptés. Ces expérimentations permettront de nous assurer que le modèle répond à certains critères théoriques. Les algorithmes de calcul de la vitesse de dépôt sec et de la diffusion seront ainsi vérifiés. Dans la seconde partie, le modèle sera utilisé pour simuler un incident survenu en 2004 à la fonderie Noranda CEZinc de Salaberry-de-Valleyfield. Les résultats de cette simulation seront évalués statistiquement en les comparant aux observations. Finalement, nous présenterons un exemple de simulation illustrant l'utilité de notre modèle Lagrangien stochastique pour la modélisation de la dispersion des polluants émis par des sources routières. Cet exemple montrera comment notre modèle peut être utilisé pour simuler la dispersion des particules fines émises par le réseau routier de la région de Montréal.

3.1 Vérification du calcul de la vitesse de dépôt sec

La vérification complète d'un algorithme de calcul de la vitesse de dépôt sec exigerait l'analyse d'une grande quantité de données d'observations pour plusieurs types de terrain (Seinfeld et Pandis, 1998). Une telle analyse dépasse le cadre de ce mémoire. Nous avons donc restreint notre analyse à une comparaison des vitesses de dépôt sec obtenues à l'aide de notre modèle avec

des mesures publiées par Sehmel (1980) pour différentes tailles de particules et pour différentes vitesses de friction.

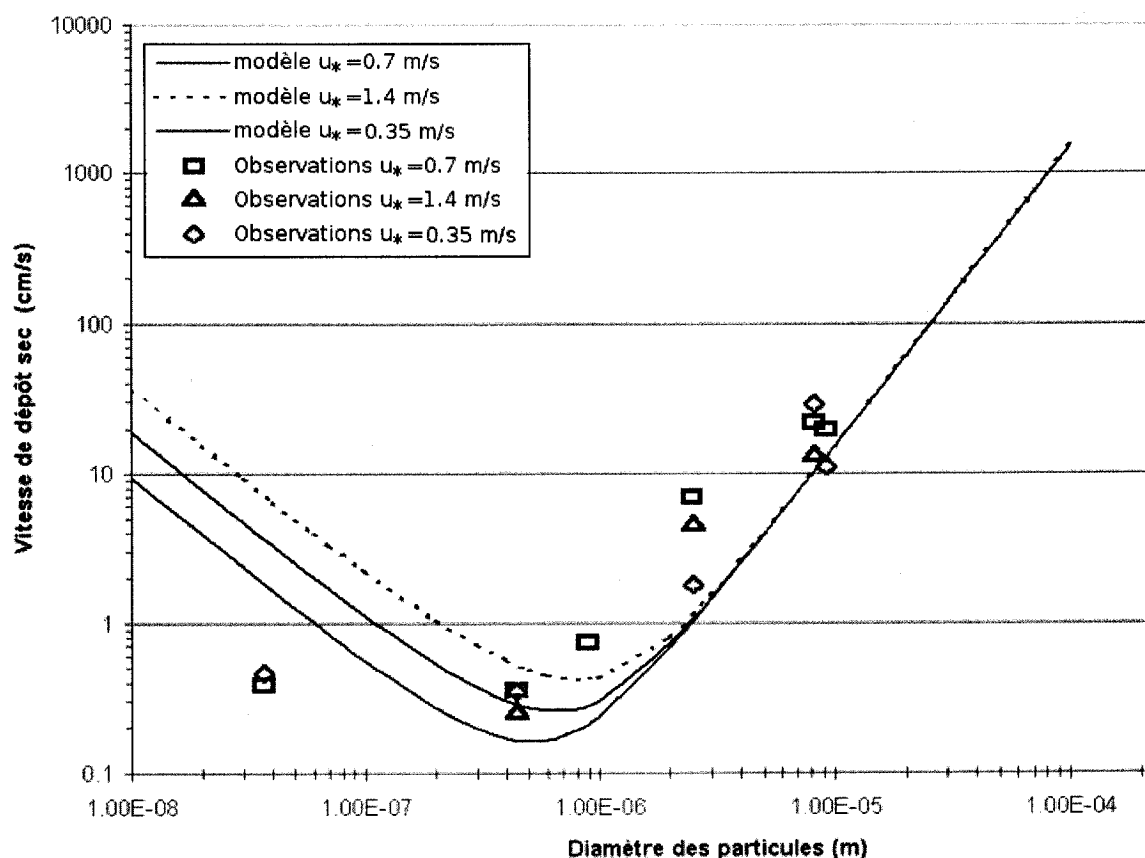


Figure 3.1 : Comparaison des valeurs calculées de la vitesse de dépôt sec avec des observations de Sehmel (1980).

Dans la figure 3.1, les points isolés correspondent aux valeurs des observations pour différentes tailles de particules. Ces mesures ont été prises sur une surface gazonnée avec des vents différents. Ces vents correspondent à des vitesses de friction de 0.35 m/s, 0.7 m/s et 1.4 m/s. Ces vitesses de frictions, ainsi qu'une longueur de rugosité de 0.01m ont été utilisées par notre modèle afin de calculer la vitesse de dépôt sec. Pour ces simulations, nous

avons supposé que l'atmosphère était neutre. Les vitesses calculées par notre modèle sont représentées par les courbes. De façon générale, les vitesses calculées sont supérieures à celles observées pour des particules de petite taille et elles sont légèrement inférieures aux observations pour celles dont la taille est plus grande. Ce comportement est probablement dû à l'approximation de la résistance aérodynamique et de la résistance quasilaminaire qui est faite par notre modèle à l'aide de la théorie de la similarité de Monin-Obukhov. Bien que les valeurs calculées soient différentes de celles observées, les vitesses de dépôt sec calculées par notre modèle sont toutefois dans le même ordre de grandeur que celle observées.

3.2 Vérification du calcul de la vitesse de diffusion et des conditions aux frontières

Nous avons utilisé l'approche expérimentale suggérée par Stohl et Thomson (1999) afin de vérifier si notre modèle respecte le critère de Thomson. Pour ce faire, nous avons supposé que l'atmosphère était dans un état stationnaire et nous avons fixé la valeur des différents paramètres de la couche limite : hauteur de la couche limite $h = 1010$ m, longueur de Monin-Obukhov $L = -100$ m, vitesse de frottement $u_* = 0.5$ m/s, hauteur de réflexion $z_r = 10$ m. Nous avons supposé que les particules ne subissaient aucun déplacement horizontal et que le mouvement vertical synoptique était nul. Nous avons supposé que la densité de l'air était constante pour chacun des niveaux de la couche limite. Un total d'un million de particules virtuelles a été relâché. La position verticale de chacune de ces particules est choisie de façon uniforme entre z_r et h . Nous avons ensuite simulé le déplacement de ces particules pour une période de 100 heures. À la fin de la simulation, la densité moyenne des particules a été calculée pour chaque intervalle de 10 mètres dans la verticale.

Pour chacun de ces intervalles, nous avons aussi calculé l'erreur par rapport à la moyenne attendue. En effet, un modèle respectant parfaitement le critère de Thomson devrait théoriquement donner une densité moyenne qui soit exactement égale au nombre de particules divisé par le nombre d'intervalles.

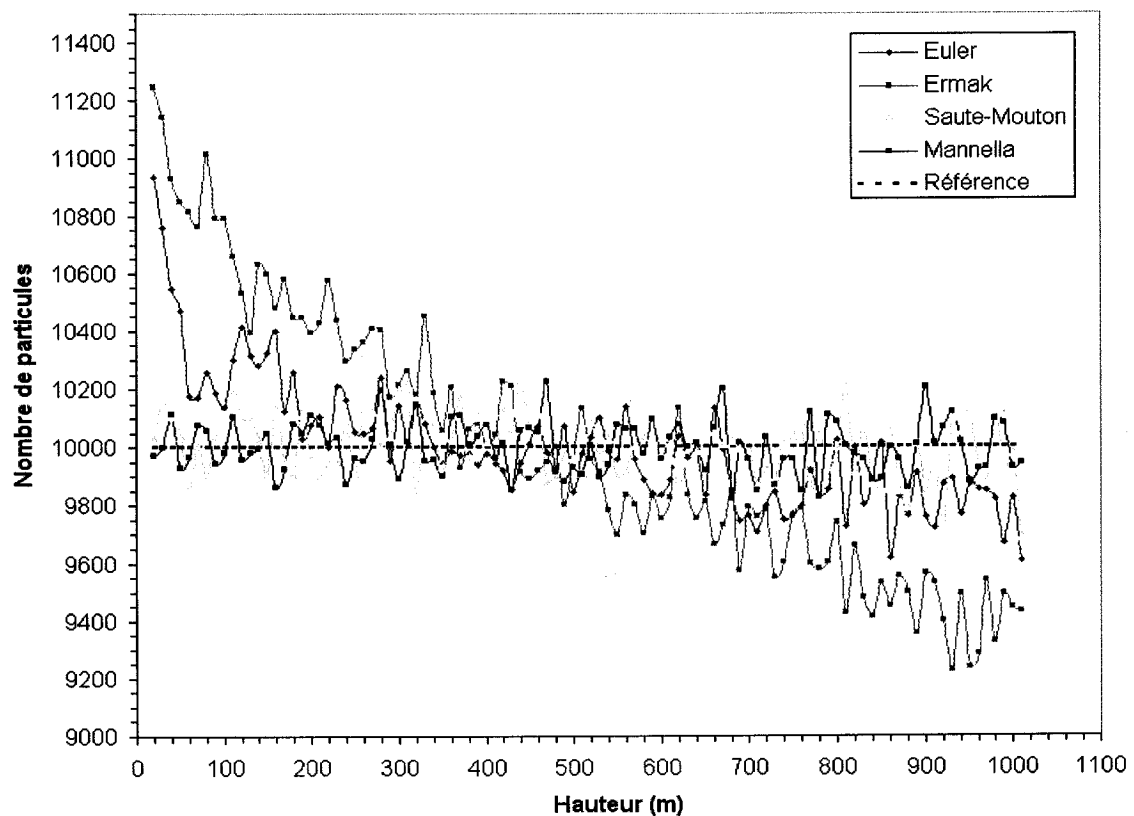


Figure 3.2 : Comparaison des algorithmes de Manella, d'Ermak, saute-mouton et d'Euler par rapport à l'état de référence (10000 particules) pour évaluer le respect du critère de Thompson.

La figure 3.2 montre les résultats obtenus en utilisant les méthodes d'Euler, d'Ermak, de saute-mouton et de Mannella afin de résoudre l'équation de Langevin. Parmi ces quatre algorithmes, les méthodes pour lesquelles l'erreur absolue maximum est la plus petite sont celles de Mannella, suivit de la méthode saute-mouton. Ces deux méthodes sont semblables, excepté que la méthode de Mannella contient une correction afin que la solution soit plus près de la solution exacte de l'équation de Langevin. Dans le cas des méthodes d'Euler et d'Ermak, l'erreur absolue maximum est environ de 9% et de 23% respectivement. Dans le cas de ces deux méthodes, la simulation produit une certaine accumulation des particules près du sol, alors que les erreurs associées aux méthodes de Mannella et saute-mouton sont réparties à peu près uniformément dans la verticale.

Tableau 3.1 : Erreur absolue maximum des algorithmes de Manella, d'Ermak et d'Euler par rapport à l'état de référence (10000 particules) après une simulation de 100 heures

Méthode numérique	Ermak	Euler	Saute-mouton	Mannella
Erreur absolue maximum	1247	935	311	226

Puisque les mêmes conditions de réflexion aux frontières de la couche limite ont été appliquées pour tous les algorithmes, nous pouvons en conclure que ces accumulations près du sol sont causées par l'imprécision des méthodes d'Euler et d'Ermak. Par rapport aux autres méthodes, les solutions obtenues par la méthode de Mannella se rapprochent davantage de la solution théorique, soit 10000 particules.

3.3 Incident à la raffinerie Noranda CEZinc de Salaberry-de-Valleyfield

L'incident à la raffinerie Noranda CEZinc de Salaberry-de-Valleyfield, en banlieue de Montréal, constitue une bonne opportunité pour vérifier la qualité des simulations de notre modèle dans des conditions réelles. Le 9 août 2004 à 21h47, on estime qu'environ 6 tonnes métriques de trioxyde de soufre (SO_3) ont été accidentellement relâchées dans l'atmosphère suite à un bris mécanique (Paquin et D'Amours, 2005). CEZinc estime qu'il a fallu 32 minutes avant que les émissions de gaz ne cessent. Ces gaz ont formé un panache visible jusqu'à 50 km de son point d'origine (Paquin et D'Amours, 2005).

Le SO_3 relâché dans l'atmosphère s'est rapidement combiné à la vapeur d'eau présente dans l'air afin de former un nuage d'acide sulfurique (Paquin et D'Amours, 2005). Étant donné que la combinaison du SO_3 et de l'eau forme un acide fort (H_2SO_4), l'équilibre de la réaction tend vers la production de SO_4^{2-} et de H_3O^+ . Par conséquent, le nuage de gaz relâché devrait former principalement des aérosols à base de SO_4^{2-} (sulfate) et, dans une plus faible mesure, des aérosols à base de H_2SO_4 et de HSO_4^- .

Cette grande quantité d'aérosol a été détectée par les stations de mesures de la région de Montréal. De plus, cet incident a été simulé à l'aide des modèles MLCD et MLDP0 et les résultats ont été documentés dans un article publié par Paquin et D'amours (2005). Bien que nous ayons utilisé une configuration différente de celle utilisée par le modèle de dispersion MLDP0, nos données météorologiques proviennent aussi du modèle GEM. Par conséquent, il nous a été possible de comparer les résultats de notre modèle avec ceux qui ont été publiés par Paquin et D'amours (2005).

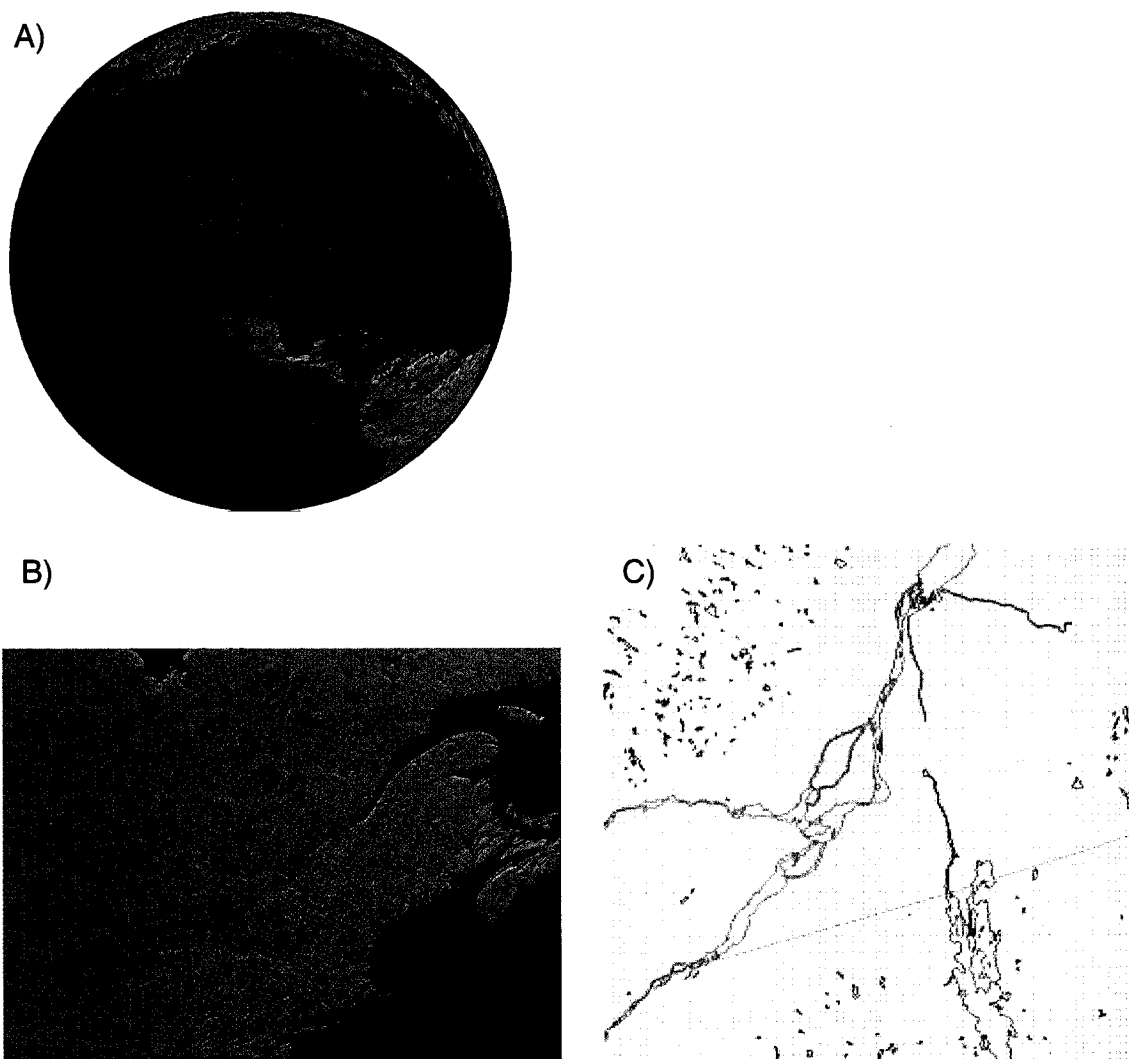


Figure 3.3 : Grilles utilisées pour générer les champs météorologiques. **A)** Grille régionale à 15 km de résolution au-dessus de l'Amérique du Nord, **B)** Grille LAM à 2.5 km de résolution sur la région du sud du Québec, **C)** Grille polaire stéréographique nord vraie à 60 degrés au-dessus de la région de Montréal.

Les champs météorologiques utilisés par notre modèle nous proviennent d'une cascade de deux simulations du modèle GEM. La figure 3.3 montre les grilles utilisées pour chacune des simulations de GEM. La configuration de la première simulation est basée sur celle qui est utilisée par Environnement Canada pour ses prévisions à l'échelle régionale. Les points de cette grille sont placés avec un espacement constant de 15 km au-dessus de l'Amérique du Nord et un espacement variable ailleurs (figure 3.3 A)). Les sorties de ces simulations sont ensuite utilisées afin de fournir les conditions initiales et les conditions aux frontières d'une autre simulation de GEM à 2.5 km de résolution sur la région du sud du Québec (figure 3.3 B)). La configuration utilisée est celle d'un LAM (Limited Area Model) (Desgagné et al., 1997). Les premiers pas de temps de la simulation à haute résolution servent à initialiser le modèle. Par conséquent, nous n'utilisons pas les trois premières heures de la simulation. Seule la partie centrale de la grille est gardée, puisque cette région est celle où le modèle est le plus précis. La figure 3.3 C) montre finalement la grille polaire stéréographique sur laquelle les données météorologiques ont été fournies à notre modèle. Tout comme la grille du GEM-LAM, cette grille a une résolution de 2.5 km. Puisque la conversion des données implique des interpolations, nous avons vérifié les résultats, en les comparant à l'analyse objective, afin de nous assurer qu'il n'y avait pas de perte de qualité.

Des données d'observations aux différentes stations de l'Île de Montréal ont été obtenues d'Environnement Canada, du Ministère du Développement Durable de l'Environnement et des Parcs du Québec ainsi que de la Ville de Montréal. Ces stations ont enregistré des concentrations anormales de particules ayant une taille inférieure à $2.5 \mu\text{m}$. La direction des vents, ainsi que l'heure à laquelle ces mesures ont été prises permettent de relier ces concentrations élevées à l'incident de la raffinerie CEZinc (Paquin et D'Amours,

2005). De plus, la taille des aérosols produits par la réaction du SO_3 avec la vapeur d'eau contenue dans l'air est typiquement plus petite que $2.5 \mu\text{m}$ (Paquin et D'Amours, 2005). La figure 3.4 montre la position de la raffinerie, ainsi que celle des stations de mesure sur l'Île de Montréal.

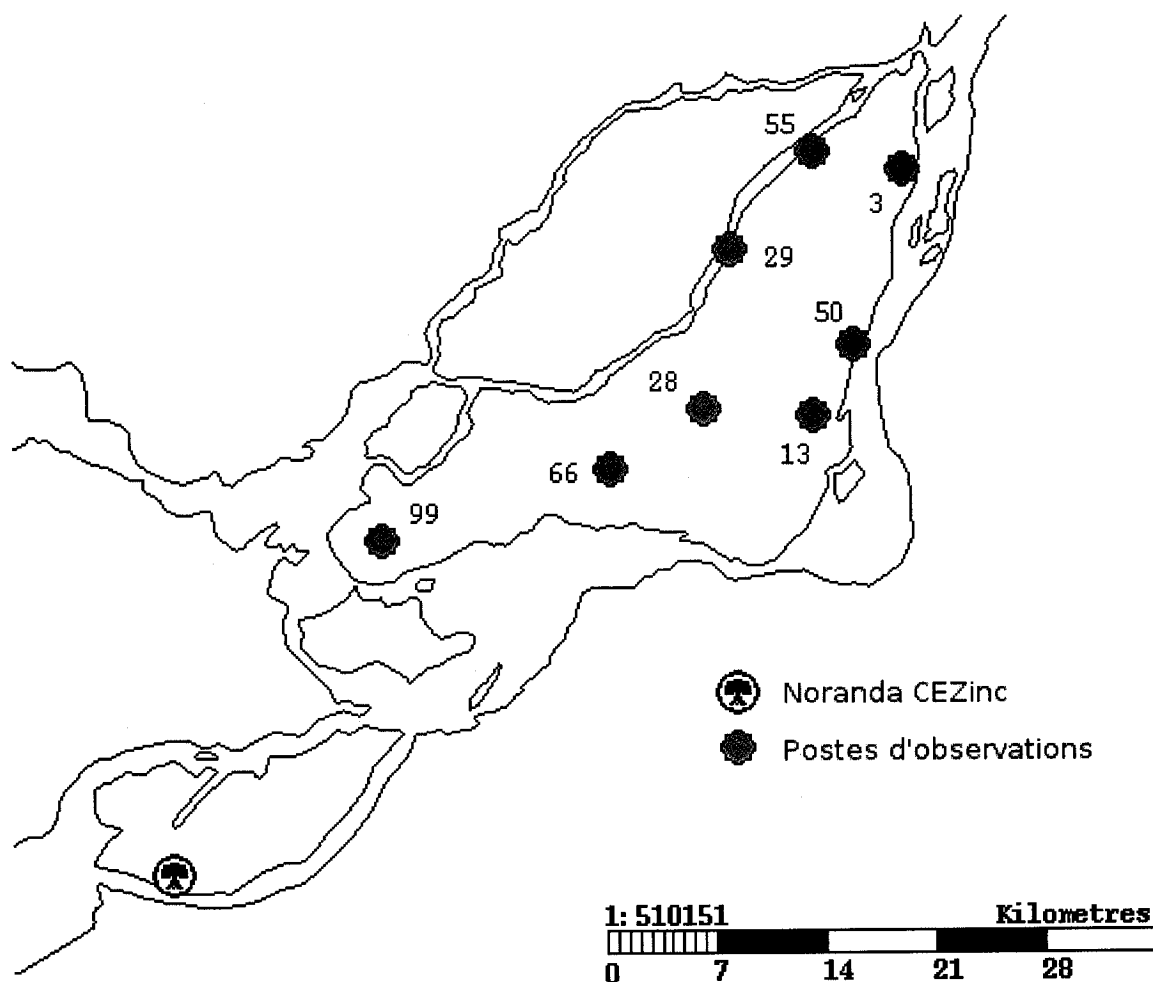


Figure 3.4 : Cartographie de l'emplacement de la raffinerie Noranda CEZinc (en jaune) et des stations de mesure de la qualité de l'air (en bleu).

Dans un premier temps, nous avons modélisé la source d'émission comme une source ponctuelle. Puisque l'usine compte plusieurs cheminées dont les hauteurs varient entre 60 et 80 mètres, nous avons représenté ces sources sous la forme d'un cylindre. Celui-ci a une hauteur de 20 mètres et un diamètre de 10 mètres. Sa base est située à 60 mètres d'altitude (Paquin et D'Amours, 2005). Des photos satellites ont permis de localiser la position de ces cheminées. Dans ce cylindre, nous avons progressivement relâché 100 000 particules virtuelles sur une période de 32 minutes. La masse totale de ces particules virtuelles était de 6 tonnes métriques. Nous avons ensuite simulé la dispersion de ces particules pour une période de 6 heures débutant à 22:00 HAE. Nous avons utilisé un pas de temps d'advection de 15 minutes. Ce pas de temps est trois fois plus grand que celui utilisé par Paquin et D'amours³.

La progression simulée du panache est montrée à la figure 3.5. Selon nos simulations, il est passé au-dessus de l'Île de Montréal entre 23:15 et 1:45. Les autorités rapportent effectivement que des citoyens de Lachine ont téléphoné vers 23:30 au 911 afin de signaler un nuage de gaz (Paquin et D'Amours, 2005). Les données prises aux stations de mesures corroborent aussi ces résultats.

La figure 3.6 montre une comparaison avec les mesures de PM_{2.5} prises aux stations de mesures afin d'évaluer la qualité des simulations de notre modèle. Les concentrations volumiques de PM_{2.5} de cette simulation ont été calculées à l'aide d'un cylindre de 3.5 km de rayon et d'une hauteur de 50 m. Aux trois stations (13, 28 et 50) où des concentrations anormales de PM_{2.5} ont été mesurées, on constate que le panache simulé par le modèle passe au dessus de la station au moment où il a été observé. Les concentrations

³ Communication avec Réal D'amours.

modélisées sont toutefois inférieures à celles observées, en particulier au poste 50. Les concentrations modélisées au poste 50 sont semblables à celles qu'ont obtenus Paquin et D'amours (2005) avec le modèle MLDP0 (Paquin et D'Amours, 2005). Par contre, au poste 13 les concentrations obtenues par notre modèle sont plus près des valeurs observées.

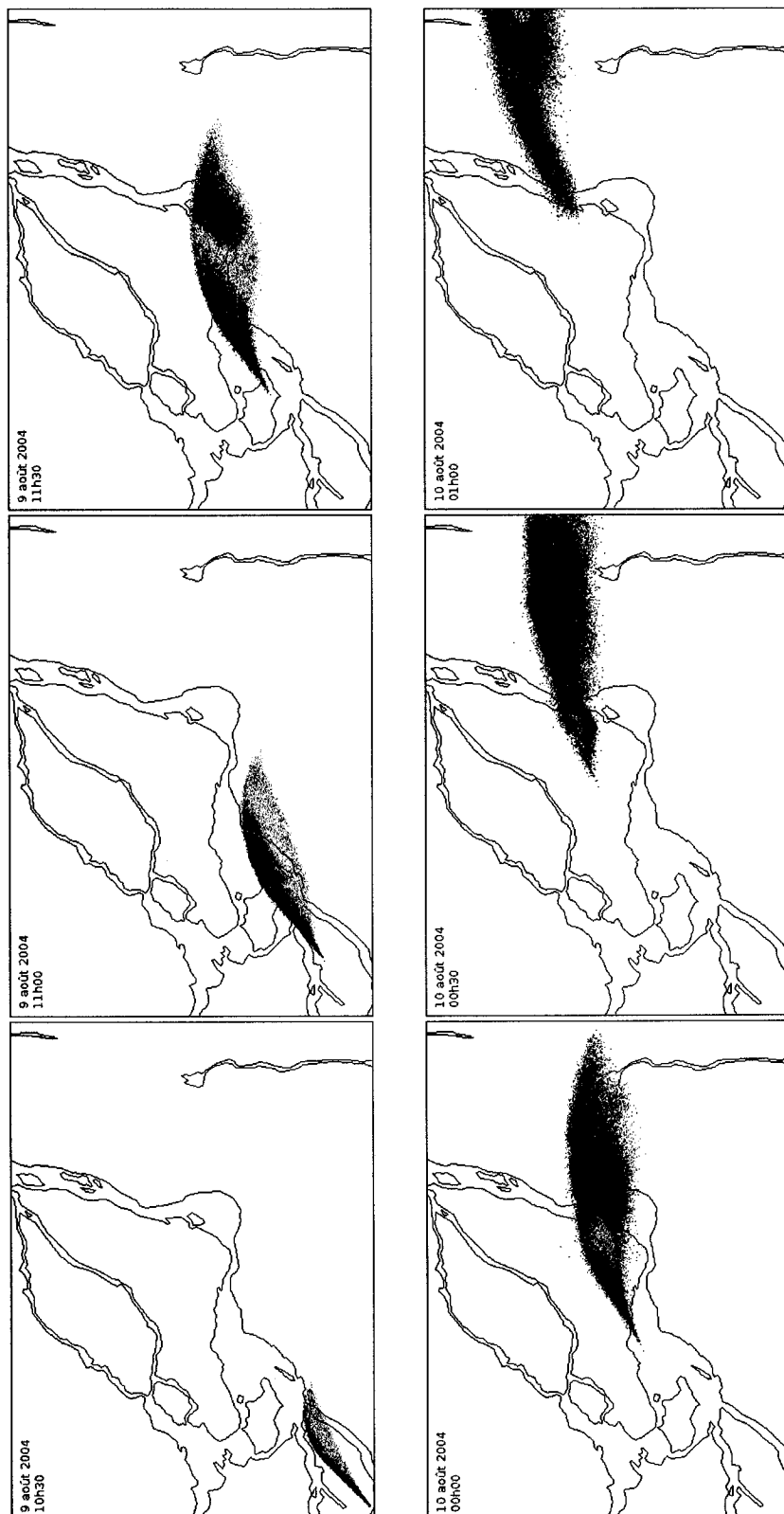


Figure 3.5 : Simulation de la progression du panache au-dessus de la région de Montréal.

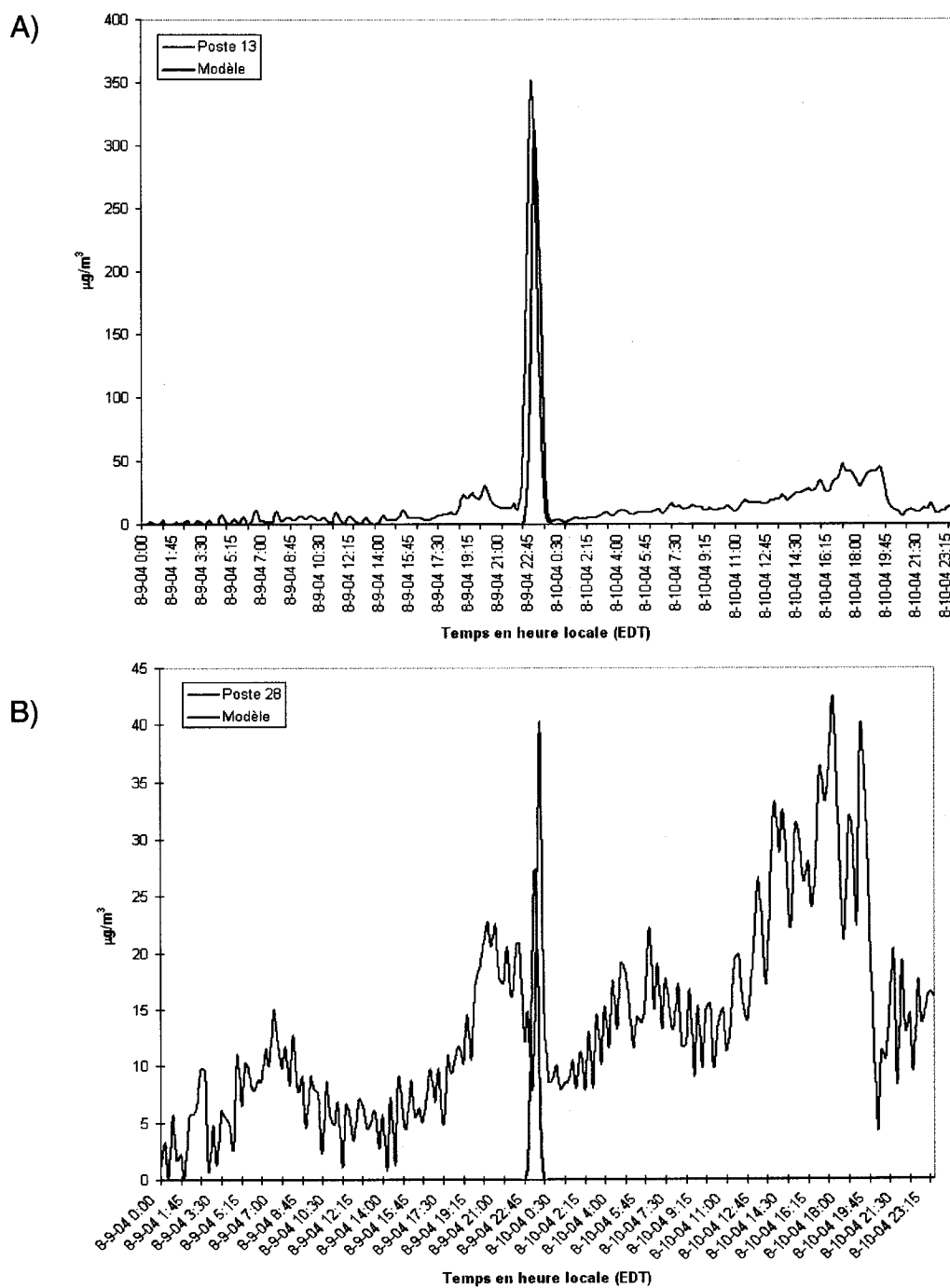


Figure 3.6 : Comparaison entre les concentrations prédites par le modèle et les mesures de PM_{2.5} prises aux stations de mesure.

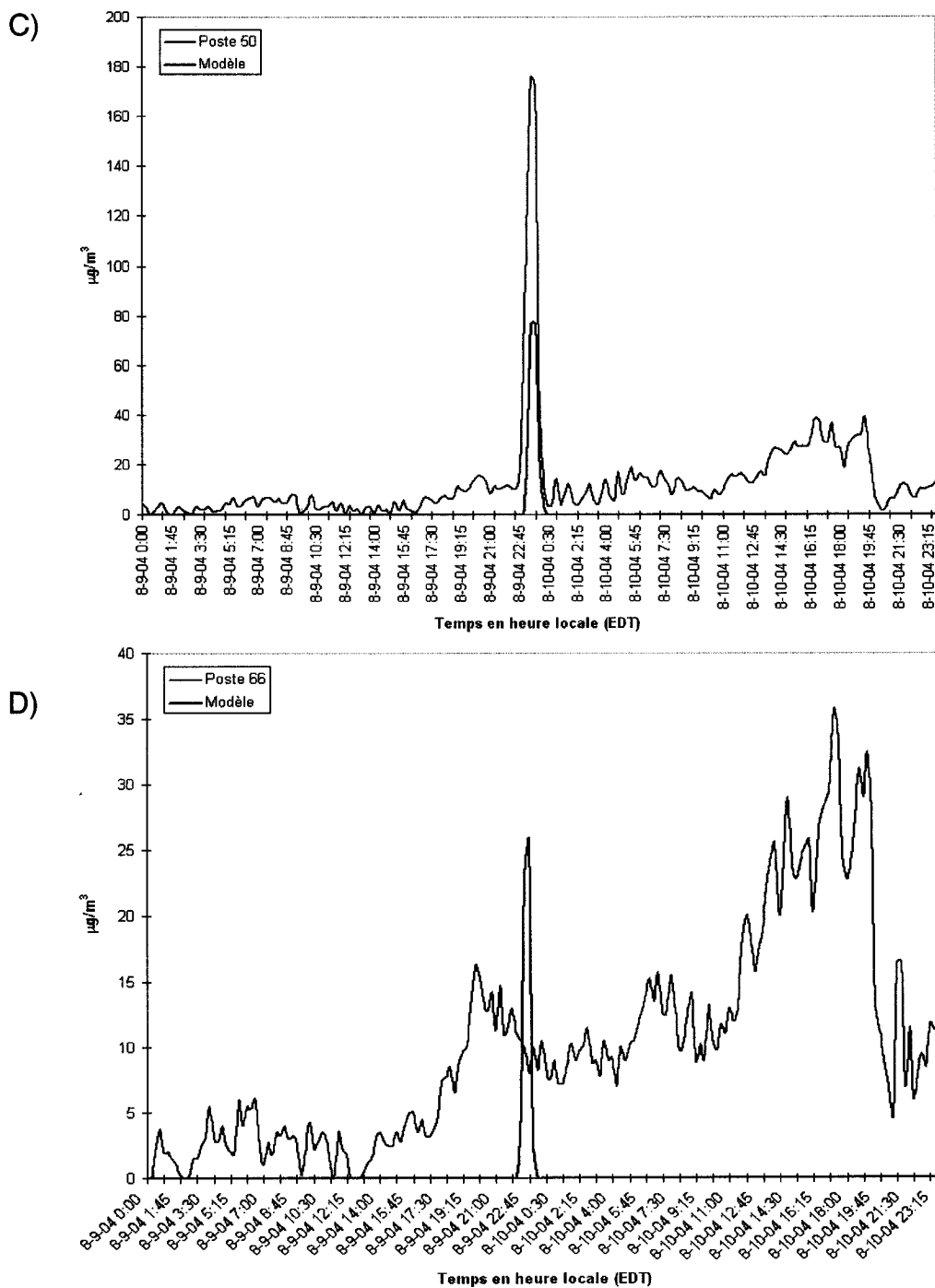


Figure 3.6 : Comparaison entre les concentrations prédites par le modèle et les mesures de PM_{2.5} prises aux stations de mesure. (Suite)

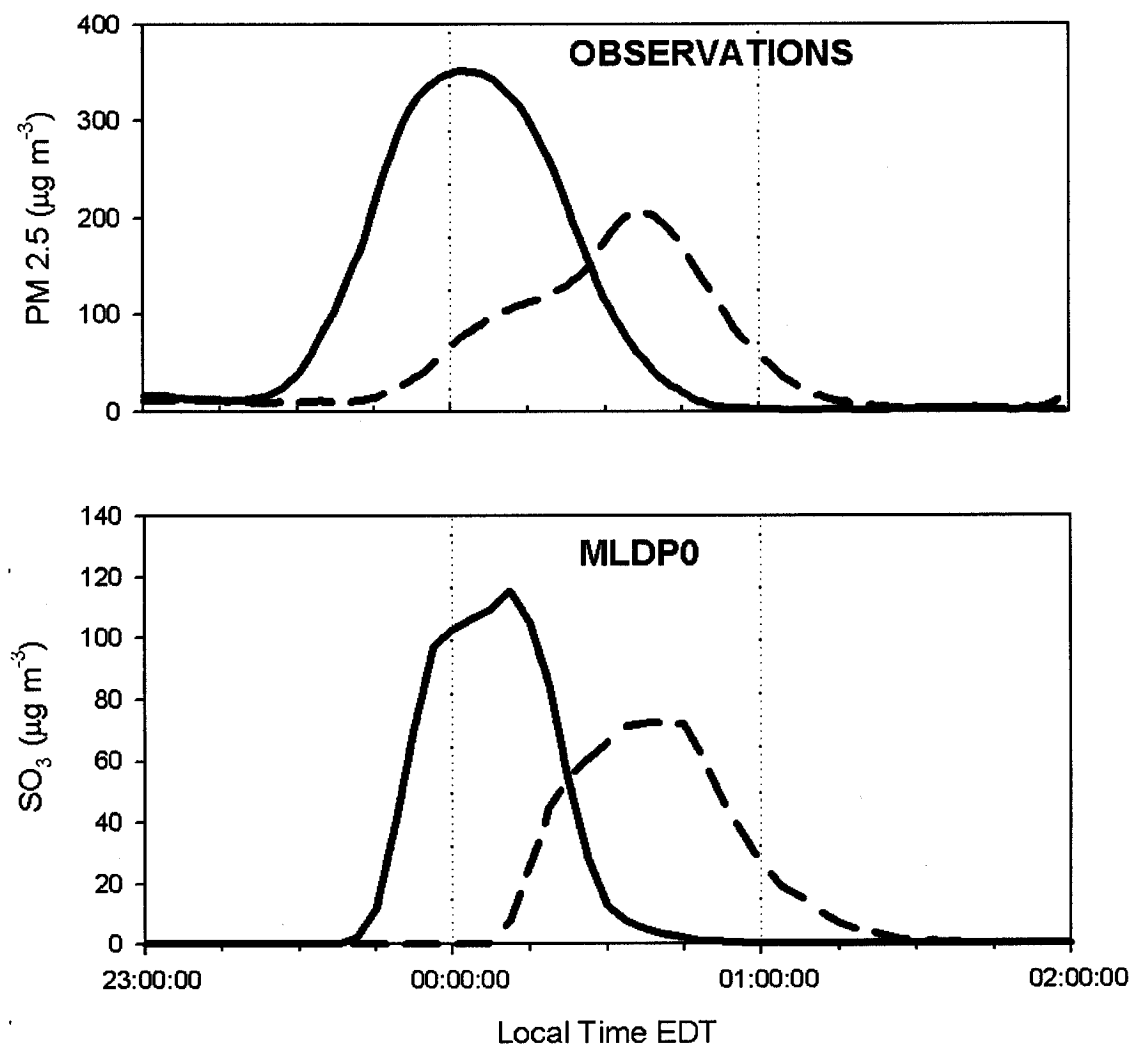


Figure 3.7 : Comparaison entre les concentrations prédites par le modèle MLDP0 et les mesures de PM2.5 (Paquin et D'Amours, 2005). La ligne brisée représente les concentrations observées et simulées à la position du poste 50 alors que la ligne pleine représente celles au poste 13.

Paquin et D'amours (2005) expliquent cette sous-estimation des concentrations par le fait que le SO_3 peut se combiner avec plusieurs molécules d'eau afin de former des particules de sulfate. Il est donc possible que la masse totale de $\text{PM}_{2.5}$ créée suite à ce relâchement soit plus élevée que celle qui a été émise initialement (Paquin et D'Amours, 2005). Puisque nous ne disposons pas de données concernant la composition chimique des particules mesurées, il nous est impossible de savoir quelle est la proportion exacte de sulfate parmi les particules mesurées (Paquin et D'Amours, 2005).

L'incertitude qui entoure les données d'émission pourrait être une autre explication possible des différences entre les valeurs modélisées et observées. Par exemple, la quantité de SO_3 émise est estimée à 6 tonnes environ, mais on ne connaît pas la quantité exacte. De plus, notre simulation ne tient pas compte des autres sources de $\text{PM}_{2.5}$. À la figure 3.6, on peut voir que les valeurs observées au début de la simulation oscillent entre 5 et 15 $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Puisque la norme canadienne pour les $\text{PM}_{2.5}$ est de 25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ en moyenne sur 24 heures (en se basant sur des moyennes horaires), on peut considérer ce niveau comme normal. Lorsque la courbe des observations atteint son maximum, on peut donc supposer qu'une petite partie des $\text{PM}_{2.5}$ observées proviennent d'une autre source que celle que nous avons modélisée.

L'échelle spatiale à laquelle sont définies les données météorologiques est une autre source d'incertitude dans notre modélisation. Par exemple, si on considère les postes 13 et 50, qui ne sont qu'à quelques kilomètres de distance l'un de l'autre, on constate d'importantes différences au niveau des valeurs maximum qui ont été observées. En plus de l'hypothèse avancée par Paquin et D'amours (2005), cette différence de concentration pourrait aussi s'expliquer par les modifications de l'état de l'atmosphère qui sont induites par la présence

d'édifices et par l'activité humaine dans les zones urbaines. Les édifices peuvent modifier l'écoulement des vents et l'activité humaine peut modifier légèrement la température (Nunez et Oke, 1977). Cela peut avoir un impact sur la trajectoire et le comportement diffusif d'une certaine quantité de particules (Makar, 2006). La modélisation de ces phénomènes météorologiques à haute résolution dans les zones urbaines est un domaine de recherche très actif (Hogue, 2006). Ce type de modélisation requiert une résolution spatiale beaucoup plus fine que celle que nous avons utilisée lors de nos simulations avec le modèle GEM-LAM.

Au poste d'observation 66, nous obtenons une concentration légèrement plus grande que celle qui a été observée. Comme l'indique la figure 3.8, le panache est passé à quelques kilomètres de la station de mesure. Le cylindre de 3.5 km de rayon que nous avons placé autour de la station afin d'évaluer la concentration volumique frôle donc le panache. Cette erreur est probablement due à une imprécision dans l'évaluation des concentrations volumiques plutôt qu'au modèle de dispersion comme tel.

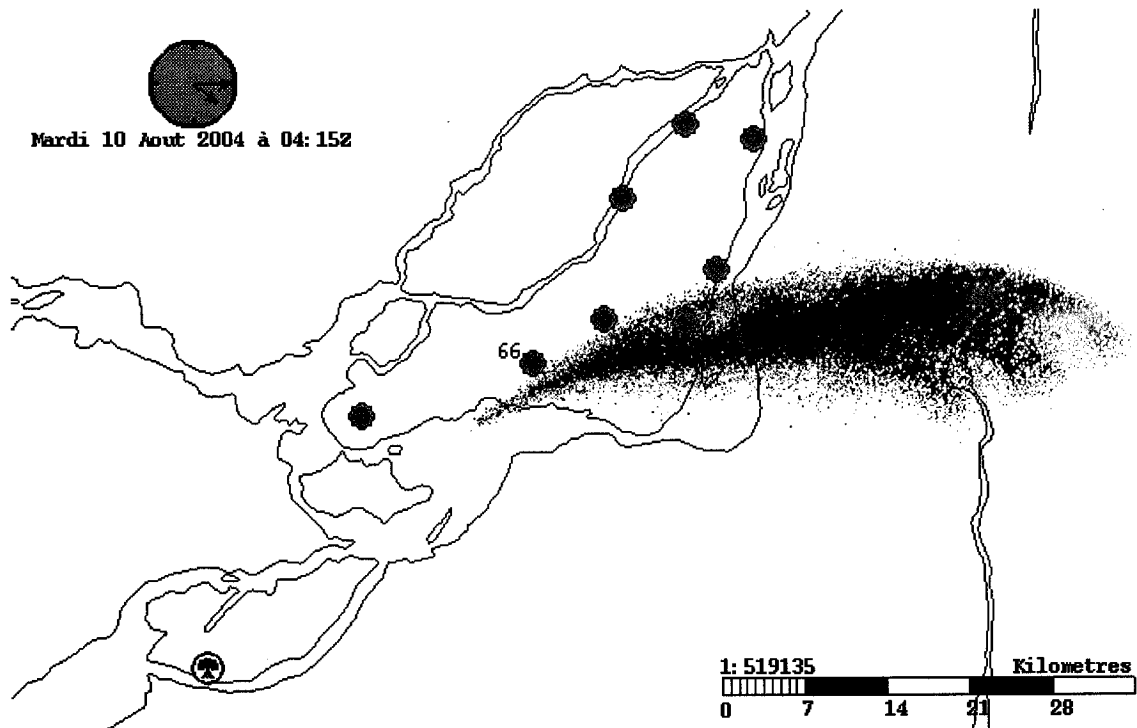


Figure 3.8 : Position du panache de gaz à 4:15Z (23:15 EDT).

Afin de vérifier cette hypothèse, nous avons comparé les concentrations obtenues avec celles de volumes récepteurs de différentes tailles. Le tableau 3.1 présente des statistiques qui mesurent le degré de ressemblance entre les prévisions de notre modèle Lagrangien et les observations prises par les stations de mesures. Pour les différentes simulations, nous présentons le coefficient de corrélation linéaire de Pearson (PEARSON), le biais moyen (MB), l'erreur maximale (E-MAX), ainsi que l'erreur quadratique moyenne (RMSE). Ces statistiques sont définies à l'annexe A. Un modèle parfait devrait avoir un PEARSON de 1, ainsi qu'un MB, un E-MAX et un RMSE de 0. Comme le souligne Flesch et al. (2004), avec un modèle parfait, les statistiques devraient être meilleures avec l'utilisation d'un récepteur ayant un petit volume.

Tableau 3.2: Statistiques pour des simulations de l'incident à la raffinerie Noranda CEZinc utilisant des volumes récepteurs de tailles différentes.

	Biais moyen	RMSE	Pearson	E-Max	C_{min}
Rayon : 3.5 km Hauteur : 50 m	-12.2	26.64	0.8034	10.8	0.0031
Rayon : 3.5 km Hauteur : 25 m	-8.8	35.24	0.7671	29.8	0.0062
Rayon : 3.5 km Hauteur : 75 m	-13.5	27.94	0.8277	41.3	0.0020
Rayon : 1.5 km Hauteur : 50 m	-10.1	44.58	0.6755	38.2	0.1697
Rayon : 2.5 km Hauteur : 50 m	-11.3	33.03	0.7342	23.4	0.0061
Rayon : 4 km Hauteur : 50 m	-12.4	26.01	0.8330	67.7	0.0023

Pour cela, il faut que le nombre de particules soit assez grand pour que la simulation soit statistiquement valide et que la capacité minimale de prévision C_{min} soit suffisamment petite (Flesh et al., 2004). En observant le tableau 3.1, on constate que ce n'est pas le cas. Le passage d'un rayon de 3.5 km à un rayon de 1.5 km ou de 2.5 km détériore la plupart des statistiques. De même, l'erreur maximale, ainsi que le coefficient de corrélation de Pearson sont détériorés si on diminue la hauteur du cylindre de 50 m à 25 m. Flesch et al. (2004) ont rapporté des tendances similaires lors de la vérification de leur modèle MLDP avec les données de l'expérience ETEX. Selon eux, l'utilisation d'un volume récepteur plus grand aurait pour effet d'homogénéiser les concentrations dans l'espace. Les critères que nous avons mentionnés au chapitre 2 nous ont servi de base afin de déterminer la taille du volume récepteur. Nous avons choisi des volumes récepteurs de tailles égales, car les stations sont situées à des distances comparables de la source. Puisque la résolution de la grille de notre

modèle météorologique était de 2.5 km et que toutes les stations de mesures avec lesquelles nous comparons nos simulations sont des stations urbaines, nous avons choisi d'utiliser un cylindre ayant 3.5 km de rayon et 50 m de hauteur.

En conclusion, la simulation de cet incident nous permet d'évaluer la qualité des résultats de notre modèle. Le modèle prévoit des concentrations qui sont inférieures à celles observées. Il y a toutefois une bonne corrélation (environ 0.75) entre ses résultats et les mesures. En particulier, le fait d'obtenir des résultats semblables à ceux d'un modèle sophistiqué comme MLDP0 est très encourageant.

3.4 Application à la simulation de la dispersion des particules fines émises sur le réseau routier de la région de Montréal

Les émissions de particules fines sur le réseau routier de la région métropolitaine de Montréal sont représentées par un shapefile. Celui-ci est construit à partir de données d'émissions fournies par le Ministère des Transports du Québec. Ces données d'émission sont estimées par le modèle MOTREM (modèle de transport de la région de Montréal) sur chacun des segments de routes (Earth Tech inc et Ministère des Transports du Québec, 2003). Ces 26 543 segments de routes, totalisant environ 13 740 km, sont montrés à la figure 3.9. La période modélisée est la période de pointe du matin s'échelonnant de 6h à 9h pour un jour ouvrable moyen d'automne en 2006. Plusieurs espèces chimiques sont modélisées par MOTREM. Notre modèle utilise les données d'émissions de particules fines (PM). Celles-ci sont classées en deux catégories : les particules de taille inférieure à 10 micromètres et celles de taille inférieure à 2,5 micromètres. Les émissions de particules fines

comprennent celles résultant de la combustion de carburant, de l'usure des pneus et des freins. Elles ne comprennent toutefois pas les émissions de PM fugitives, c'est-à-dire les PM remises en suspension par le passage des véhicules (Babin, 2004). Selon le Ministère des Transports du Québec, ces PM forment une partie très importante des émissions du réseau routier. La modélisation des PM fugitives est en cours d'étude au Ministère des Transports du Québec.



Figure 3.9 : Réseau routier de la région de Montréal utilisé pour les simulations de dispersion des PM_{2.5}. (Source des données : Ministère des transports du Québec, Service de la modélisation des systèmes de transport, Modèle de transport de la région de Montréal, version 98)

Un modèle de la dispersion des particules fines émises par un réseau routier peut être utilisé afin d'évaluer l'impact qu'aurait une modification de ce réseau sur les concentrations de polluants mesurées à différents endroits. Ces changements pourraient être la construction d'une nouvelle route, la fermeture partielle ou totale d'une route ou encore des changements dans la circulation des véhicules. Des modèles de transports, comme MOTREM, permettent d'évaluer l'impact de ces changements au niveau des taux d'émissions sur chacune des routes. Ils ne permettent toutefois pas d'en connaître l'impact à d'autres endroits. Par exemple, il n'est pas possible de savoir si les concentrations de particules fines vont changer au centre-ville de Montréal si on construit un nouveau pont reliant l'Île à sa banlieue nord. Cependant, en combinant les nouveaux taux d'émissions du modèle de transport avec notre modèle de dispersion, il serait possible de comparer les résultats de simulations avec un cas de base pour connaître l'impact d'un tel projet sur une région donnée. Puisque notre modèle ne simule pas les processus chimiques, ce type d'étude est d'un intérêt limité pour les polluants secondaires (c'est-à-dire ceux issus de réactions chimiques). Par contre, une partie importante des particules émises par le réseau routier sont très peu réactives (les PM fugitives par exemple). Pour ce type de polluant, notre modèle offre donc une façon simple et rapide de mener des études d'impacts environnementaux.

Bien que ce type d'application des modèles Lagrangiens soit prometteur, elle pose un problème de taille. En effet, l'utilisation d'un modèle de dispersion pour l'évaluation de l'impact environnemental d'un changement au réseau routier n'a de sens que si le modèle de dispersion est représentatif de la réalité. Le modèle doit donc être capable de simuler correctement la position et la concentration des masses de polluants émis par les sources routières. À première vue, on pourrait être tenté de comparer ces simulations aux mesures

prises par le réseau de stations de mesures afin de déterminer si le modèle correspond à la réalité ou non. Cette approche ne peut cependant pas être utilisée pour un modèle spécialisé comme le nôtre. En effet, comme on peut le constater dans l'exemple montré à la figure 3.10, les concentrations prédites sont systématiquement différentes de celles observées. Cela s'explique en grande partie parce que les stations de mesures ne font aucune distinction entre les particules fines émises par le réseau routier de celles provenant d'autres sources comme les industries. De plus, notre modèle ne tient pas compte des gaz et des particules provenant de l'extérieur du domaine de simulation. Des études, telles que celles de Simpson et al. (2002), ainsi que McKendry et al. (2001), ont en effet permis de mettre en évidence l'importance du transport à longue distance des polluants dans l'air.

Afin de valider l'usage de notre modèle pour le transport routier, il faudrait donc rassembler des données d'observations qui soient le plus possible spécifiques aux véhicules routiers. Puisque notre modèle de dispersion donne de bons résultats lorsqu'appliqué sur un cas concret comme celui de la CEZinc, nous croyons qu'il est raisonnable de penser que le calcul de la dispersion donnera aussi de bons résultats pour cette application. Pour vérifier les résultats des simulations de la dispersion des particules émises par le réseau routier, il serait nécessaire de prendre des mesures à différents endroits aux abords des routes et sous différentes conditions météorologiques. Ces mesures devraient être prises de façon à s'assurer qu'elles ne mesurent que les polluants émis par la route. La mise sur pied d'une telle campagne de mesure dépasse toutefois le cadre de cette étude.

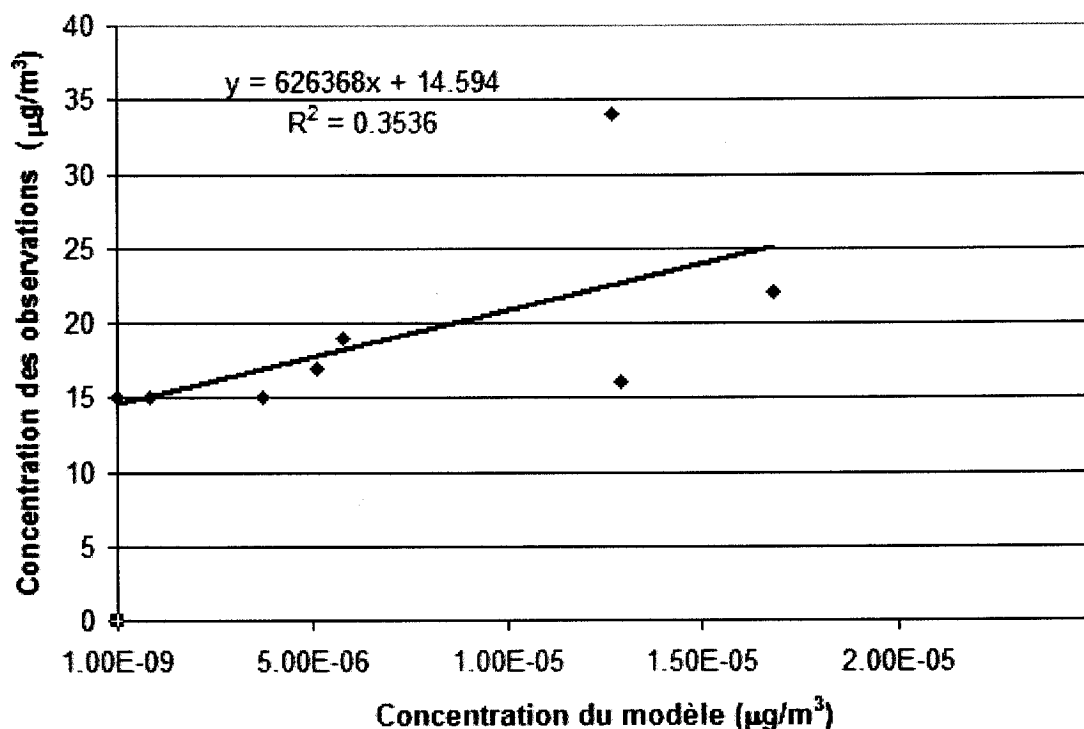


Figure 3.10 : Comparaison des concentrations de PM_{2.5} avec des observations lors d'une simulation du réseau routier de la région de Montréal le 6 octobre 2005 à 13:00Z. La position des stations de mesure est montrée à la figure 3.4. (Source des données d'émissions : Ministère des transports du Québec, Service de la modélisation des systèmes de transport, Modèle de transport de la région de Montréal, version 98)

Comme le montre la figure 3.10, ce type de simulation ne permet pas d'obtenir des concentrations semblables aux observations prises par les stations de mesure. Ce grand écart entre les observations et les valeurs obtenues par le modèle peut être expliqué par le fait que notre modèle ne tient pas compte de toutes les sources d'émissions. À elle seule, cette explication n'est pas suffisante, car on estime généralement dans la littérature scientifique que la contribution du secteur des transports au total des PM_{2.5} qui sont émis est de 17,1% (Ministère du Développement durable, de l'Environnement et des Parcs,

2002). Les valeurs rapportées ici sont clairement plus petites que la contribution estimée. Une autre explication possible est l'incertitude qui existe au niveau des données d'émission sur le réseau routier. Des données moyennes, comme celles-ci, ne sont pas appropriées pour la simulation d'un scénario réel, car elles ne tiennent pas compte des particularités du trafic urbain pour une journée donnée. Par exemple, un incident pourrait causer des embouteillages dans une partie de la ville. Les concentrations de polluants émis sur les routes congestionnées devraient alors être différentes de celles que l'on obtiendrait lorsque la circulation y est fluide. Les concentrations des polluants émis seront alors différentes de celles contenues dans l'inventaire à partir duquel on travaille. De plus, les taux d'émissions sont constants tout au long de la simulation alors que le flot de véhicules sur chacun des arcs de route peut varier grandement au cours du temps. Pour que de telles simulations puissent être comparables aux observations, il faudrait donc développer des inventaires d'émissions qui soient davantage représentatifs du flot réel de véhicules sur le réseau routier. Les émissions de polluants pourraient, par exemple, être calculées à partir d'informations comme les caméras de surveillance ou des images satellitaires.

Des simulations comme celles que nous avons réalisées ne sont toutefois pas totalement dénuées d'intérêt puisqu'elles pourraient être utilisées afin de comparer différents scénarios d'émission. De telles études peuvent en effet être d'une aide précieuse afin de déterminer quelle sont les meilleures actions à prendre pour améliorer la qualité de l'environnement.

CONCLUSION

Dans cette étude, nous avons décrit un modèle Lagrangien stochastique permettant de simuler la dispersion des polluants dans la couche limite de l'atmosphère. L'objectif était d'obtenir un modèle qui soit en mesure de reproduire de façon très détaillée le transport des polluants et qui soit peu coûteux en terme de ressources informatiques. À ce titre, nous avons examiné des approches algorithmiques différentes de celles qui sont généralement utilisées dans ce domaine.

La trajectoire d'une particule est calculée à partir de la somme de trois vitesses. La vitesse d'advection est résolue grâce à la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Cela nous a permis d'augmenter la taille du pas de temps d'advection de nos simulations, tout en conservant des résultats comparables à ceux des autres modèles. La vitesse de diffusion, qui est décrite par l'équation de Langevin, a été résolue par la méthode de Mannella. Cette méthode permet d'obtenir des solutions respectant mieux le critère de Thomson et son coût, en terme de temps de calcul, est acceptable. Nous avons aussi déterminé des algorithmes pour simuler les conditions initiales et les conditions aux frontières. Les conditions initiales du système sont les sources d'émission. Nous avons choisi de représenter deux types de sources dans notre modèle : des sources linéaires et des sources ponctuelles. La gestion des conditions aux frontières a été faite à l'aide de l'approche de Wilson et Flesch (1993) à laquelle nous avons ajouté le calcul de la vitesse de dépôt sec des aérosols. Finalement, nous avons utilisé la méthode des volumes récepteurs afin de calculer la concentration volumique des particules en des lieux géographiques et des moments donnés. Le choix des paramètres du volume récepteur servant au calcul des concentrations est un aspect très important dans l'élaboration d'une simulation.

Nous avons donc élaboré quelques règles empiriques afin de guider nos choix. Celles-ci sont basées sur une analyse subjective de l'incertitude du modèle ainsi que sur des données qui lui sont fournies en entrée. Ces algorithmes, en particulier celui de Mannella, pourraient être implantés dans d'autres modèles Lagrangiens stochastiques afin d'en améliorer les performances et la qualité des résultats.

Nous avons présenté diverses expériences réalisées avec notre modèle dans le but d'évaluer les performances des simulations. Le calcul de la vitesse de dépôt sec a été comparé sommairement avec des observations. Les vitesses obtenues étaient du même ordre que celles mesurées. Nous avons aussi comparé les méthodes d'Euler, d'Ermak, saute-mouton et de Mannella afin de déterminer laquelle respecte le mieux le critère de Thomson. Les méthodes de Mannella et saute-mouton ont donné les meilleurs résultats, mais la méthode de Mannella est celle pour laquelle l'erreur absolue maximum est la plus petite.

Pour chaque type de source, nous avons présenté un exemple de simulation. Nous avons ainsi modélisé la dispersion des polluants émis par le réseau routier de la ville de Montréal. Le réseau routier a alors été représenté par un ensemble de sources linéaires. La vérification de ce type d'application pose toutefois un problème étant donné le manque de données d'observations permettant de valider les simulations. Nous avons aussi présenté une simulation où la source était une source ponctuelle. Cette simulation de l'incident survenu en 2004 à la raffinerie CEZinc, nous a permis de confronter les résultats de notre modèle avec des mesures prises sur le terrain. Notre modèle donne des résultats semblables à ceux publiés par Paquin et D'Amours (2005). Le panache simulé par le modèle passe au dessus de la station au moment où il a été observé. Les concentrations simulées sont inférieures à celles observées, mais

notre modèle parvient tout de même à reproduire les différences d'intensité entre les concentrations de stations différentes.

Travaux futurs

Tout modèle mathématique a ses limites et ses restrictions, celui présenté dans le cadre de cette étude n'échappe pas à cette règle. Ces limitations pourraient faire l'objet de nouvelles études.

Les simulations que nous avons faites sur le réseau routier de la ville de Montréal sont difficilement comparables avec des données d'observation. Il serait entre autre nécessaire d'améliorer les inventaires d'émission afin de tenir compte des variations possibles des concentrations émises.

Les polluants qui sont émis par les automobiles proviennent principalement de la combustion du carburant. Il serait donc intéressant de refaire la simulation sur le réseau routier de Montréal en utilisant des émissions de polluants comme le monoxyde de carbone, les oxydes d'azote ou encore les composés organiques volatiles.

La précision de notre modèle est limitée par la résolution des données météorologiques et des données concernant la morphologie du terrain. À quelques endroits dans notre étude, nous n'avons pas réussi à déterminer exactement comment ces imprécisions affectent notre modèle. Nous voudrions caractériser plus précisément ces impacts. De plus, il serait intéressant d'étudier et de comparer différentes méthodes permettant de calculer les concentrations volumiques.

Dans un article publié récemment en 2006, Mannella a présenté une méthode plus générale permettant de construire des algorithmes d'ordre 2 ou supérieur (Mannella, 2006). Nous voudrions étudier l'impact de telles méthodes sur la qualité des résultats de nos simulations.

Finalement, nous voudrions simuler un plus grand nombre de processus dans notre modèle afin de mieux représenter la complexité de l'atmosphère. Par exemple, notre modèle ne tient pas compte des processus chimiques qui ont lieu dans l'atmosphère.

Nous voudrions finalement développer de nouvelles applications pour notre modèle dans d'autres domaines. Puisque celui-ci n'est pas limité par le type de maillage servant à décrire le fluide environnant, il pourrait être couplé à d'autres modèles. Par exemple, nous pourrions le coupler avec un modèle de vague afin de simuler la dispersion de nappes d'huile suite à un déversement pétrolier. De plus, il serait aussi intéressant d'étudier comment un modèle Lagrangien pourrait être utilisé afin d'initialiser un modèle de la chimie atmosphérique de type Eulérien ou semi-lagrangien. Lors des premiers pas de temps, il serait ainsi possible de représenter plus adéquatement la trajectoire des polluants émis par les points de sources majeures qui ne sont pas dans le voisinage immédiat d'un point de la grille du modèle.

RÉFÉRENCES

ALLEN, M.P., TILDESLEY, D.J. (1987). « Computer Simulation of Liquids ». Oxford : Clarendon Press. 404p.

BABIN, A et TREMBLAY, P. (2004). Modélisation des émissions de sources routières et de leur dispersion dans la région de Montréal. *Congrès annuel de l'APCAS*. Montréal.

BABIN, A. (2004). Modèle d'estimation des émissions fugitives de particules de matière sur les routes pavées pour la région de Montréal dans le cadre du MOTREM (et pour la région de Sherbrooke avec MOTRESh). *Service de la modélisation des systèmes de transport Ministère des transports du Québec. Rapport technique*.

BATROUNI, G.G. et al. (1985). Langevin simulation of lattice field theories. *Physical review D*. 32:10. 2736-2747.

BELJAARS, A.C.M. et HOLTSLANG, A.A.C. (1991). Flux Parametrization over Land Surface for Atmospheric Models. *Journal of applied Meteorology*. 30:3. 327-341.

BENOIT, R., DESGAGNÉ, M., PELLERIN, P., PELLERIN, S., DESJARDINS, S., CHARTIER, Y. (1997). The Canadian MC2: a semi-Lagrangian, semi-implicit wide-band atmospheric model suited for fine-scale process studies and simulation. *Mon. Wea. Rev.* 125. 2382-2415.

BOUCHET, V. (2006). Vers une discussion de modèles PQA. *Atelier de formation en prévision de la qualité de l'air*. Dorval : Centre Météorologique Canadien. Section 4d.

BRZEZINSKI, D.J. et NEWELL, T.P. (1998). MOBILE6 A Revised Model for Estimation of Highway Vehicle Emissions. *8th Annual U.S. EPA and AWMA Emission Inventory Conference: Living in a Global Environment*. New Orleans, Louisiana : Environmental Protection Agency. 1. 526-567.

BURRAGE, K., LENANE, I., LYTHER, G. (2005). Numerical methods for second-order stochastic equations. [En ligne]. Queensland : *University of Queensland*. 20p. <http://www.maths.uq.edu.au/~kb/federation/vx37.pdf>
(Page consulté le 9 juillet 2006)

COFFEY, W.T., KALMYKOV, Y.P., WALDRON, J.T. (2004). The Langevin Equation : with application to stochastic problems in physics, chemistry and electrical engineering. World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics Vol. 14 - Second Edition. Singapore : *World Scientific Publishing*. 704p.

CRONE, G.C., DINAR, N., VAN DOP, H., VERVER, G.H.L. (1999). A Lagrangian approach for modelling turbulent transport and chemistry. *Atmospheric Environment*. 33:29. 4919-4934.

D'AMOURS R., MALO A., MÉNARD, S. (2004). A Zeroth Order Lagrangian Particle Dispersion Model MLDP0. Centre Météorologique Canadien : *Environnement Canada*. 19p. (Rapport interne)

DUTTON, J.A. (1995). « Dynamics of Atmospheric Motion ». New York : *Dover*. 617p.

EARTH TECH INC et MINISTÈRE DES TRANSPORTS DU QUÉBEC. (2003). Modélisation de la dispersion des polluants émis par les véhicules routiers dans la région de Montréal, Rapport technique.

EUROPEAN CENTRE FOR MEDIUM-RANGE WEATHER FORECASTS. [En ligne]. <http://www.ecmwf.int/>
(Page consultée le 9 juillet 2006)

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. (2006). Community Multiscale Air Quality (CMAQ) Model. In U.S. *Environmental Protection Agency*. [En ligne].
http://www.epa.gov/asmdnerl/CMAQ/cmaq_model.html
(Page consultée le 9 juillet 2006)

ESRI. 1998. ESRI Shapefile Technical Description. In ESRI - *The GIS Software Leader*. [En ligne].
<http://www.esri.com/library/whitepapers/pdfs/shapefile.pdf>
(Page consultée le 9 juillet 2006)

FLESH, T., WILSON, J., BRIAN, C. (2002). MLCD: A Short-Range Atmospheric Dispersion Model For Emergency Response. *University of Alberta*. 55p.

FLESH, T., D'AMOURS, R., MOONEY, C., WILSON, J. (2004). MLPD: A long-range lagrangian stochastic dispersion model, Centre Météorologique Canadien : *Environnement Canada*. 52p. (Rapport interne)

GRELL, G.A., PECKHAM, S.E., SCHMITZ, R., MCKEEN, S.A, FROST, G., SKAMAROCK, W.C., EDER, B. (2005). Fully coupled "online" chemistry within the WRF model. *Atmospheric Environment*. 39:37. 6957–6975.

HANNA, S. R. (1981). « Application in air pollution modeling. Atmospheric turbulence and Air Pollution Modelling ». Boston : *D. Reidel Publishing Company*. 275-310.

HOGUE, R. (2006). La Division de la Réponse aux urgences environnementales: 20 ans après Tchernobyl. *Séminaire RPN du 28 avril 2006*. Dorval:Centre météorologique Canadien.
<http://web-mrb.cmc.ec.gc.ca/mrb/rpn/SEM/dossiers/2006/seminaires/2006-04-28/2006-04-28-hogue-abstract.txt>. (Site web interne, consultée le 9 juillet 2006).

JACOBSON, M. Z. (2005). « Fundamentals of Atmospheric Modeling ». 2nd Edition. New York : *Cambridge University Press*. 828p.

MAKAR, P. (2006). A Comparison Between AURAMS Runs Using Operational and Parallel (Heat Island) Versions of GEM During PrAIRie 2005. *The Fourth Canadian Workshop on Air Quality*. Banff. Section 7-a-5.

MANNELLA, R. (2004). Quasisymplectic integrators for stochastic differential equations. *Physical Review*. 69. 041107-041107-8.

MANNELLA, R. (2006). Numerical stochastic integration for Quasi-symplectic flows. *Siam Journal on scientific computing*. 27:6. 2121-2139.

MCKENDRY, I.G., HACKER, J.P., STULL, R., SAKIYAMA, S., MIGNACCA, D., REID, K. (2001). Long-range transport of Asian dust to the Lower Fraser Valley, British Columbia, Canada. *J. Geophys. Res.* 106:D16. 18,361–18,370.

MÉNARD, S., D'AMOUR, R. (2000). Performances du Modèle Lagrangien d'ordre zéro dans le cadre de l'expérience ETEX pour le premier relâchement. Dorval : *Environnement Canada*. 52p. (rapport interne)

MINISTÈRE DU DÉVELOPPEMENT DURABLE, DE L'ENVIRONNEMENT ET DES PARCS. (2002), L'ozone et les particules fines : État de situation au Québec et éléments d'intervention. [En ligne]
http://www.mddep.gouv.qc.ca/air/particules_ozone/index.htm (Page consultée le 18 septembre 2006)

UNIVERSITY CORPORATION FOR ATMOSPHERIC RESEARCH, MM5 Community Model Homepage. [En ligne] <http://www.mmm.ucar.edu/mm5/>
 (Page consultée le 9 juillet 2006)

MORAN, M.D., DASTOOR, A.P., GONG, S.-L., GONG, W., MAKAR, P.A., (1998). Conceptual design for the AES unified regional air quality modelling system (AURAMS). Downsview: *Air Quality Research Branch, Atmospheric Environment Service*. 100p. Rapport interne.

NUNEZ, M. , OKE, T.R. (1977). The Energy Balance of an Urban Canyon. *Journal of Applied Meteorology*. 16:1. 11.-19.

POZRIKIDIS, C. (2001). Fluid Dynamics : Theory, Computation, and Numerical Simulation. Massachussetts : *Kluwer Academic*. 688p.

PAQUIN, P., D'AMOURS, R. (2005). An Example of Real-Time Emergency Response : The SO₃ Release in Valleyfield, Quebec. *Proceeding of the twenty-eight Arctic and Marine Oilspill Program (AMOP) Technical Seminar 7-9 juin 2005*. Calgary, Canada. 735-743.

PAULSON, C.A. (1970). The Mathematical Representation of Wind Speed and Temperature Profile in the Unstable Surface Layer. *Journal of applied Meteorology*. 9:6. 857-861.

PRESS, W.H., FLANNERY, B.P., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T. (1992). Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing. 2e édition. New York : *Cambridge University Press*. 994p.

PUDYKIEWICZ, J.A., KOZIOL, A.S. (2001). The application of Eulerian models for air quality prediction and the evaluation of emission control strategies in Canada. *International Journal of Environment and Pollution* 2001. 16. 425-438.

RADIO-CANADA. (2004). Nuage toxique au-dessus de Montréal. In Radio-Canada.ca. [En ligne].
<http://www.radio-canada.ca/nouvelles/Index/nouvelles/200408/11/002-NUAGE.shtml> (Page consultée le 9 juillet 2006)

WIKIPEDIA, (2006). Roadway air dispersion modeling. In Wikipedia. [En ligne].
http://en.wikipedia.org/wiki/Roadway_air_dispersion_modeling
(Page consultée le 9 juillet 2006)

RODEAN, C. H. (1996). « Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion ». Meteorological Monographs Series, Volume 26, number 48. Boston : *American Meteorological Society*.

RPN. (2006). Azimuthal Projection. In RPN.COMM: Community for Mesoscale Modeling. [En ligne].

http://collaboration.cmc.ec.gc.ca/science/rpn.comm/wiki1/doku.php?id=armnlib:grids:azimuthal_projection (Page consultée le 9 juillet 2006)

RYALL, D.B., MARYON, R.H. (1998). Validation of the UK Met. Office's name model against the ETEX dataset - Turbulence budgets. *Atmospheric Environment*. 32:24. 4265-4276.

SANTÉ CANADA. (2005). Le trafic routier et la pollution atmosphérique. In Votre santé et vous. [En ligne]. http://www.hc-sc.gc.ca/iyh-vsv/environ/traf_f.html (Page consultée le 30 juin 2006)

SAWFORD, B.L. (2006). Lagrangian Stochastic Modelling of Chemical Reaction in a Scalar Mixing Layer. *Boundary-Layer Meteorology*. 118:1. 1-23.

SEINFELD, J. H., PANDIS, S. N. (1998). Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. New York : *Wiley-Interscience*. 1326p.

SEHMEL, G.A. (1980). Particle and gas dry deposition: a review. *Atmospheric Environment*. 14. 983-1011.

SCHWERE, S., STOHL, A., ROTACH, W. (2002). Practical consideration to speed up Lagrangian stochastic particle models. *Computers & Geosciences*. 28:2. 143-154.

SIMPSON, J.J., HUFFORD, G.L., SERVIRANCKX, R., BERG, J., PIERI, D. (2002). Airborne Asian dust: case study of long-range transport and implications for the detection of volcanic ash. *Weather and Forecasting*. 18:2. 121-141.

STOER, J., BURLISH, R. (2002). « Introduction to numerical analysis ». 3^e édition. New York : *Springer*. 752p.

STOHL, A., THOMSON, J.D. (1999). A Density Correction For Lagrangian Particle Dispersion Models. *Boundar-Layer Meteorology*. 90. 155-167.

STOHL, A., FORSTER, C., FRANK, A., SEIBERT, P., WOTAWA, G. (2005). Technical note: The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*. 5. 4739-4799.

STULL, R.B. (1988). « An Introduction to Boundary Layer Meteorology ». *Kluwer Academic Publishers*. 666p.

THE ATMOSPHERIC STUDIES GROUP. (2006). The CALPUFF Modeling System. In The Atmospheric Studies Group at TRC. [En ligne].

<http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm> (Page consultée le 9 juillet 2006)

THOMSON, D.J. (1987). Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*. 180. 529-556.

UNESCO. Training module on GIS. In OceanTeacher. [En ligne]

http://ioc.unesco.org/oceanteacher/OceanTeacher2/other/GISModules/module_c/module_c4.html (Page consultée le 9 juillet 2006)

WEISSTEIN, E.W. (2005). Disk Point Picking. In MathWorld--A Wolfram Web Resource. [En ligne]. <http://mathworld.wolfram.com/DiskPointPicking.html>

(Page consultée le 9 juillet 2006)

WILSON, J.D., FLESCHE, T.K. (1993). Flow Boundaries in Random-Flight Dispersion Models: Enforcing the Well-Mixed Condition. *Journal of Applied Meteorology*. 32 :11. 1695-1707.

WILSON, J.D., SAWFORD, B.L. (1996). Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*. 78:1-2. 191-210.

WILSON, J.D., FLESCHE, T.K., D'AMOURS, R. (2001): Surface delays for gases dispersing in the atmosphere. *J. Applied Meteorol.*, 40, 1422-1430.

ZHANG, L., GONG, S., PADRO, J., BARRIE, L. (2001). A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module. *Atmospheric Environment*. 35:3. 549-560.

ANNEXES

ANNEXE A : STATISTIQUES UTILISÉES POUR LA VÉRIFICATION DU MODÈLE

Dans les équations suivantes, N est le nombre d'observations, O_i est la valeur d'une observation et M_i à la valeur obtenu par le modèle au même point que l'observation.

- Coefficient de corrélation linéaire de Pearson

$$\text{PEARSON} = \frac{\sum_i (M_i - \bar{M})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_i (M_i - \bar{M})^2 \sum_i (O_i - \bar{O})^2}}$$

- Biais moyen

$$\text{MB} = \frac{1}{N} (\bar{M} - \bar{O})$$

- Erreur maximale

$$\text{E-MAX} = \max_i (|M_i - O_i|)$$

- Erreur quadratique moyenne

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum \frac{(M_i - O_i)^2}{\bar{M} \times \bar{O}}}$$

$$\text{où } \bar{M} = \frac{1}{N} \sum_i M_i \text{ et } \bar{O} = \frac{1}{N} \sum_i O_i$$