Evaluation de l'incertitude de la prévision de la qualité de l'air par méthodes d'ensembles utilisant les modèles ARPEGE et CHIMERE

Evaluation of ensemble air quality forecast uncertainty using ARPEGE and CHIMERE models

Rapport Final

CONTRAT 05 62 c 0094 ADEME

Année 2007

Ana Cristina CARVALHO(1) , Laurent MENUT(1),
Robert VAUTARD(2) et Jean NICOLAU(3)

(1): IPSL/Laboratoire de Météorologie Dynamique, Palaiseau,

(2): IPSL/Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, Gif sur Yvette

(3): Météo-France, Toulouse

Contact:

Laurent MENUT (menut@lmd.polytechnique.fr)
Laboratoire de Météorologie Dynamique
Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex
Tel: (33) 1.69.33.51.75 - Fax: (33) 1.69.33.51.08

Résumé

La mise en oeuvre des techniques ensemblistes a permis une grande amélioration des résultats de prévision météorologique. Réaliser plusieurs dizaines de simulations numériques au lieu d'une, chacune subissant une perturbation initiale différente, a permis d'accéder à une information plus riche: la probabilité d'une bonne prévision est plus grande, tout en permettant l'estimation de la variabilité et donc de l'erreur de cette prévision. Dans le cadre de la prévision de la qualité de l'air, les modeles de chimie-transport, comme CHIMERE, ont atteint un degré de maturité qui permet de les utiliser quotidiennement avec une bonne confiance dans un cadre de prévision régionale de la pollution atmosphérique. L'expérience acquise en calculs d'ensembles en météorologie nous invite à explorer cet outil pour améliorer la prévision de la qualité de l'air. De plus, l'accroissement constant des ressources de calcul permet aussi de réaliser sur des cas réels et complexes ces calculs ensemblistes. Cependant, l'approche théorique des perturbations sera différente, par nature même du problème à résoudre: alors que la dynamique de l'atmosphère est un problème non linéaire sensible aux conditions initiales, la chimie atmosphérique sera surtout sensible à ses forcages (météorologie et émissions surfaciques). Il faut donc s'inspirer des méthodes issues des études météorologiques (notamment les calculs de scores) tout en repensant complètement les méthodes de perturbation.

Dans le cadre de ce travail, les prévisions quotidiennes de l'été 2006 du modèle ARPEGE de Météo-France, ainsi que son ensemble de 10 membres perturbés, sont utilisées. Chacun de ces membres ARPEGE produit la météorologie nécessaire au modèle CHIMERE qui est lui-même perturbé. En pratique, il n'est pas possible de réaliser uen dizaine de perturbations de CHIMERE pour chaque membre ARPEGE. Le but de ce projet est donc d'essayer de construire une méthode d'ensemble pour CHIMERE avec 5 à 10 membres en tout (météorologie et chimie-transport) et dont la représentativité des résultats sera proche d'une ensemble complet (une centaine de simulations). Pour cela, nous reprenons des résultats sur la sensibilité des concentrations aux paramètres du modèle afin d'aboutir à une configuration optimale de prévision d'ensemble. Les résultats montrent la prépondérance de l'influence de la météorologie sur les résultats en termes de prévision d'ozone. On propose ainsi une configuration réaliste de prévision, détaillant les perturbations à privilégier sur les émissions, les taux de photolyse et caractéristiques de la couche limite atmosphérique (épaisseur, intensité du mélange vertical). Pour les résultats de l'ensemble, il est montré que quelques fausses alarmes sont diagnostiquées en utilisant la médiane de l'ensemble mais que ces surestimations permettent une prévision quasiment systématique des pics de pollution effectivement enregistrés.

Mots-clés: prévision probabiliste de la qualité de l'air, méthode d'ensemble, ozone

Abstract

The quality enhancement of the results encountered on numerical weather prediction ensemble runs has encouraged the air quality modellers' community to test the same methodology to foresee air pollutants concentrations in the atmosphere. Conceptually, the advantage of an ensemble system relies on probabilistic results, which permits to estimate the likelihood of a certain event. In air quality forecast it is important to know in advance if the event exceedences of a certain threshold value will happen in order to implement mitigation measures concerning air pollutant emission. The ensemble system allows giving this information associated to its probability, which is not possible with a single deterministic model run, giving to the decision makers more information in order to take the right measure.

Within the work that will be presented both perturbation on the circulation model and the chemical transport model will be implemented. The ensemble system is composed by the numerical weather prediction model ARPEGE, the meteorological model MM5 and the chemical transport model CHIMERE. Meteorological perturbations will be addressed firstly by a set of 11 ensemble members derived by the ARPEGE model, which will force MM5 simulations, or CHIMERE model directly. The concept of air pollution ensemble forecast is not the same than the one for meteorology: shifting from an 'initial values' problem to a 'boundary values' problem. In this work, We propose in this work an approach for the disturbances imposed on the air quality forecast system, in particular on the emissions speciation hourly profiles, different years for the emissions inventory, boundary conditions concentrations, photolysis rate, as well as by the eleven ensemble weather forecasts. The

The analysis of the results obtained during a simulation period of strong photochemical production, during the summer 2006, showed a more pronounced influence of the weather processes on the variation of surface ozone concentrations. The median of the ensemble results over-estimates the number of false alarm of the of ozone threshold level for the public information whereas the success rate is nearly 100%.

Key-words: air quality probabilistic forecast, ensemble approach, ozone

1. Introduction

La nature chaotique de l'atmosphère se manifeste dans la résolution numérique des équations différentielles, qui présentent des solutions distinctes pour des valeurs légèrement différentes des conditions initiales. D'ailleurs, les erreurs associées aux dispositifs instrumentaux de mesure ne permettront jamais de mesurer les conditions initiales de l'atmosphère sans incertitude [Delle Monache et al, 2006a] et les prévisions sans déviation de la réalité sont une chimère dans l'état actuel de la connaissance.

Basé sur la définition du système dynamique chaotique donné par Lorenz (1963), le concept de prévision d'ensemble a été employé, dà bord, pour estimer la dépendance de l'incertitude de prévisions météorologiques aux erreurs des conditions initiales imposées aux modèles de prévision numérique [Hamill et al., 2000]. Le Centre Européen pour les Prévisions Météorologiques à Moyen Terme (CEPMMT-ECMWF), sur l'Europe, et le Centre National pour la Prévision Environnementale (NCEP), aux Etats-Unis, ont été les premières centres de prévisions à les appliquer. Aujourd'hui, la prévision numérique du temps basée sur la méthode dè nsembles opérationnels est disponible dans beaucoup dì nstitutions gouvernementales de prévision météorologique étant donné que la plupart des résultats d'ensemble ont prouvé que cette méthodologie fournit une meilleure exactitude des prévisions météorologiques que l'application déterministe d'un modèle [Delle Monache et al., 2006a].

La nature stochastique des champs de concentration en polluants a été formulée et étudiée par Venkatram (1979). Pour cet auteur, le concept de la moyenne d'ensemble d'un modèle a été analysé par rapport aux validations des modèles gaussiens, dans une approximation d'état d'équilibre. En ce cas, c'est plutôt sur les mesures que le concept dè nsemble est appliqué, llm portant étant les considérations de temps pour faire la moyenne des résultats des modèles, étant données un ensemble de mesures autour d'une source dè mission ponctuelle. Pendant la période entre 1979 et 2000, la complexité des modèles de qualité de l'air a augmenté, mais le développement et l'évaluation des modèles ont été surtout basé sur des simulations déterministes des modèles.

En raison des résultats prometteurs produits par les prévisions d'ensemble avec les modèles numériques de prévision du temps, Dabberd et Miller (2000) ont suggéré que les applications de qualité de l'air peuvent aussi tirer bénéfice des simulations probabilistes, puisqu'elles permettent dè stimer la concentration et sa probabilité associée au lieu d'une valeur simple produite par un modèle déterministe. Galmarini et al., (2004) discute la pertinence de ce type de résultats pour le processus de décision en ce qui concerne l'application de mesures de réduction d'émissions de polluants atmosphériques. Pour ces auteurs, l'analyse de risques à partir des résultats dè nsembles et sa variabilité réduit le risque de manque de fiabilité et enrichit le processus décisionnel, puisque l'information disponible est augmentée.

En général, les prévisions numériques du temps utilisent, a priori, différentes techniques pour choisir les perturbations des conditions initiales qui permettent dì ncorporer les sources plus rapides de perturbation et de dispersion importante de résultats dans les membres de l'ensemble opérationnel. Dans les systèmes de modélisation de la qualité de là ir, les dispersions sur ces résultats sont dérivées non seulement par les conditions météorologiques mais également par les conditions frontières et par les émissions des polluants pour l'atmosphère. Les conditions initiales de qualité de l'air peuvent être importantes dans les 24 premières heures prévues quand les procédures d'assimilation de données sont incluses dans le système de modèles comme indiqué par Blond et Vautard (2004). Néanmoins, l'effet de l'assimilation d'observation sur les résultats de modèles devient faible après les 24 premières heures de simulation. Ce fait est dû à l'importance que les émissions, les conditions de bord chimiques et la météorologie ont sur la modulation de la concentration dò zone dans un endroit particulier. Par conséquent, ces auteurs concluent quìl n'est pas

suffisant d'assimiler des observations afin d'obtenir un état initial chimique plus correct, mais qu'il est également important d'inclure dans le processus d'assimilation les autres sources des incertitudes des systèmes de modèles de la qualité de l'air - telles que la météorologie, les émissions et les conditions de bord.

Cependant, comme dans les applications numériques de prévision du temps, le système d'ensembles est limité par les ressources informatiques disponibles. Delle Monache et al. (2004) donnent la première description, dans la littérature, d'une conception possible d'un système opérationnel de qualité de l'air basé sur la prévision d'ensemble. Les résultats parvenant de ce genre de systèmes peuvent être encore améliorés a travers l'incorporation des observation passées et les résultats des modèles de prévision par des techniques tels que le filtre Kalman [Delle Monache et al., 2006b] et la régression linéaire dynamique [Pagowisk et al., 2006].

Les non-linéarités existantes dans la description de la physique et chimie de l'atmosphère font que les modèles numériques sont sensibles à certains facteurs. Par exemple, à l'incertitude sur les conditions initiales, à la prévisibilité atmosphérique, à l'incertitude sur la dynamique, physique et mécanismes chimiques des systèmes de modèles. [Vautard et al., 2006] présente une liste de travaux effectués sur chacune de ces perturbations et les résultats en concentrations de polluants obtenus avec l'approche d'ensemble.

La construction d'une application d'ensemble chimique, en se fondant sur l'approche d'ensembles, doit contenir une ou plusieurs sources d'incertitude. Delle Monache et al. 2006a et Galmarini et al. [2004] ont classé la conception de l'ensemble de la qualité de l'air selon les perturbations introduites pour dériver ses membres. Ils l'ont fait chacun d'une manière légèrement différente. Galmarini et al, 2004 organisent le système d'ensemble selon la combinaison du nombre de modèles de circulation et de dispersion, mais les perturbations sont admises seulement sur les conditions initiales ou la combinaison de modèles utilisés (Figure 1):

i. Un seul modèle météorologique (ou dit de « circulation ») et un seul modèle de dispersion avec des perturbations des conditions initiales dans le modèle de circulation;
ii. Un seul modèle météorologique et un seul modèle de dispersion avec des perturbations d'ensemble des conditions initiales pour la dispersion;
iii. Plusieurs modèles de circulation avec un seul modèle de dispersion;
iv. Un seul modèle de circulation et plusieurs modèles de dispersion;
v. Plusieurs modèles de circulation et de dispersion.

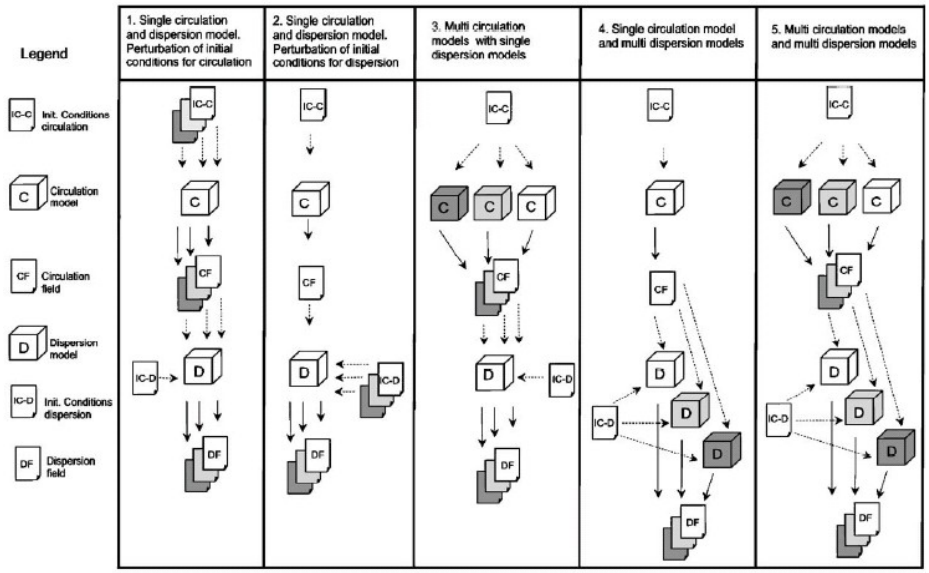


Illustration 1: Schéma des 5 méthodes pour obtenir des membres d'ensemble dans un système numérique de qualité de l'air, selon [Galmarini et al., 2004].

Par ailleurs, [Della Monache et al., 2006a], emploient une classification plus proche de celle produite pour les applications en météorologie, qui essayent de relier les systèmes d'ensemble avec les incertitudes produites par les conditions initiales, la prévisibilité atmosphérique, l'incertitude dans la dynamique et la physique du modèle qui sont :

1. différentes entrées météorologiques/émissions;
2. différents paramétrisations dans un seul modèle;
3. différents schémas numériques dans un modèle simple
4. différents modèles.

2. Le système de modèles de la qualité de l'air

Le système de simulation de la qualité de l'air adopté pour ce travail est le modèle de chimie transport CHIMERE [Vautard et al., 2001; Bessagnet et al., 2004]. Ce modèle eulérien 3D est développé par l'Institut Pierre-Simon Laplace (IPSL) et l'Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS). C'est un modèle qui fournit des résultats de concentrations de photo-oxydants et de particules, à plusieurs échelles spatiales et temporelles en mode opérationnel, notamment a l'échelle continentale et nationale. Pour cela il a besoin des données météorologiques, d'émissions de polluants atmosphériques et des conditions de bords d'espèces gazeuses et de particules (Figure 2). L'inclusion de la technique de *one-way nesting* permet l'obtention de résultats à l'échelle urbaine forcée aux limites par la version continentale de CHIMERE. Des cartes de prévision de concentration des polluants sont accessibles au grand public via une interface web (http://prevair.ineris.fr/). De plus, ce modèle peut aussi être utilisé sur des cas d'études, comme dans le cas présent.

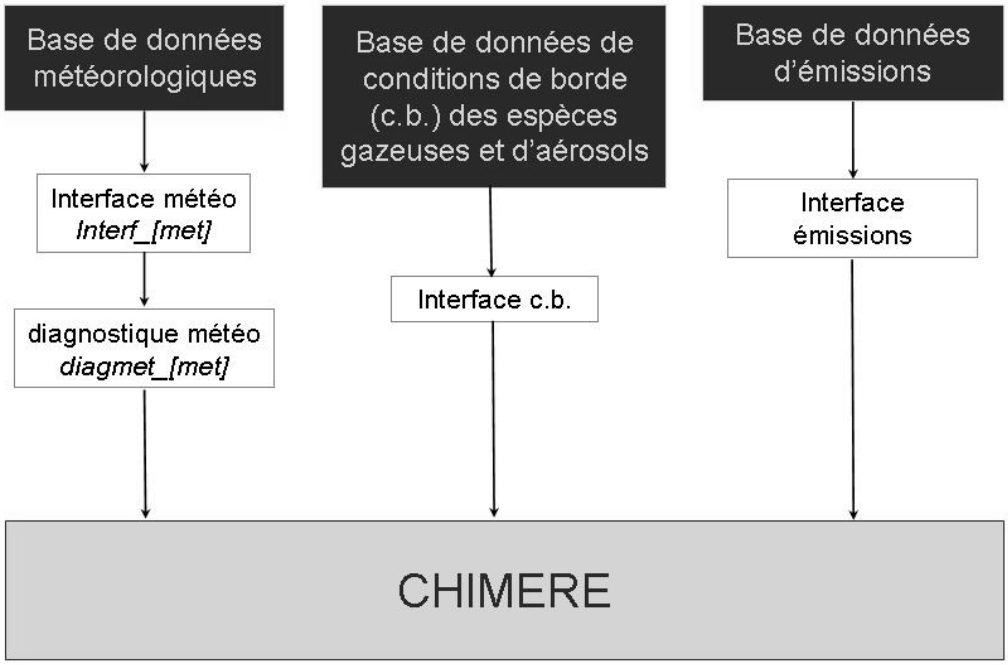


Illustration 2: Schéma de la structure des données d'entrée à considérer par CHIMERE (adapté de http://euler.lmd.polytechnique.fr/chimere/).

Le modèle CHIMERE a été concu pour pouvoir réaliser des simulations en ne disposant que des grandeurs principales de l'écoulement atmosphérique: les composantes du vent (zonal et méridional), la température, l'humidité spécifique, la pression, le contenu en eau liquide, la température à 2 m, la précipitation convective et de large-échelle. Les autres paramètres météorologiques peuvent être paramétrés comme l'atténuation du rayonnement solaire, la hauteur de la couche limite, la vitesse de rugosité, la résistance aérodynamique, le flux de chaleur sensible et la vitesse de convection.

Les émissions surfaciques de polluants, de caractère soit anthropique soit biogénique sont calculées pour chaque domaine de simulation, en considérant aussi la météorologie dans le cas des émissions biogéniques.

Les émissions anthropogéniques de NO_X, SO_2, CO et composés organiques volatiles non méthaniques (NMVOC) sont interpolées, dans le space et le temps, à la maille CHIMERE à partir de la base de données EMEP (http://www.emep.int). Les besoins de CHIMERE sont une quantité d'espèce émise par heure alors que seuls les totaux annuels sont fournis par EMEP. Un processus de désagrégation est réalisé par application d'une succession de facteurs temporels qui prennent en compte les échelles mensuelle, journalière et horaire, pour tous les secteurs d'activité inclus dans les émissions EMEP. La spéciation de NMVOC est prise de Passant et al., (2002).

Les conditions chimiques aux limites sont apportées par les résultats de modèles globaux. Les conditions de bord de composants en phase gazeuse sont les résultats des climatologies mensuelles du modèle global de chimie transport chimie LMDZ-INCA2 [Hauglustaine et al., 2004], et ainsi la concentration de certaines espèces est considérée constante pendant un mois spécifique. Les mêmes considérations sont imposées à des concentrations d'aérosols recalculées au bords du domaine CHIMERE à partir des résultats du

modèle GOCART [Ginoux et al., 2001]. Comme composants d'aérosols troposphériques principaux à considérer il y a les aérosols de sulfate, les poussières désertiques, les aérosols émis par les océans, le charbon noir et le charbon organique.

Pour cette étude deux configurations de modèles ont été essayées: tout d'à bord ARPEGE-MM5-CHIMERE et finalement ARPEGE-CHIMERE. ARPEGE est le modèle de forçage global dans le deux systèmes.

1. La premiere chaine de modélisation ARPEGE-MM5-CHIMERE utilise le modèle météorologique MM5 comme interface entre les données d'ARPEGE et CHIMERE. Ce choix a été fait afin de bénéficier des paramétrisations de MM5 déjà employées dans les chaines expérimentales (l'IPSL/LMD) et opérationnelles (INERIS) et donc nous assurait d'une certaine cohérence avec des simulations déjà réalisées et analysées dans le cadre de notre analyse.

2. La seconde chaine liant directement ARPEGE à CHIMERE devrait être celle retenue au final, car pemet de réaliser des prévisions beaucoup plus rapidement; argument vital dans un contexte de mise en place d'une méthodologie à finalité de prévision.

ARPEGE est un modèle global spectral à maille variable (*Figure 3*). Sa résolution spectrale nominale actuelle correspond à une troncature T358 avec un coefficient d'étirement de 2.4. Sa troncature varie donc de T860 (~20km sur la France) à T149 (~115km sur la Nouvelle-Zélande). Il possède 41 niveaux verticaux (bientôt 46) compris entre 17 m et 1 hPa. Il dispose d'une assimilation variationnelle quadri-dimensionnelle (4DVAR) qui utilise des observations classiques (sondages, bouées, observations de surface, observations avions) et satellitales (vents de nuages des satellites géostationnaires et sondeurs ATOVS des satellites défilants). Sa physique comprend un ensemble complet (rayonnement, couche limite et diffusion, précipitations grande échelle et convection, effet sur grande échelle des ondes de gravité orographiques). Ce modèle est lancé 4 fois par jour, à 00h UTC (102h), 06h UTC (72h), 12h UTC (84h) et 18h UTC (60h).

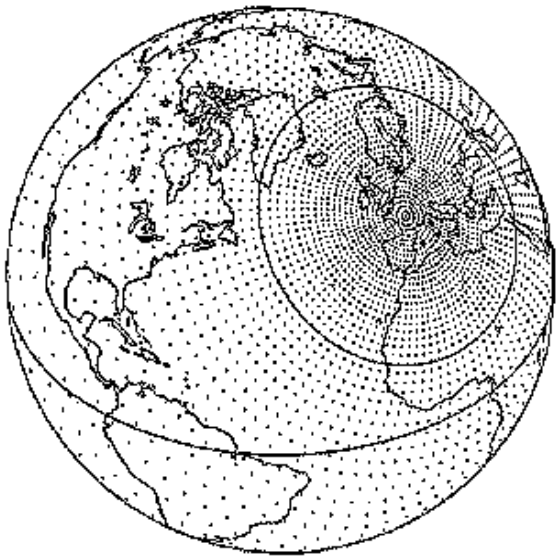


Illustration 3: Grille physique du modèle ARPEGE.

3. Mise en oeuvre du système de modèles pour la prévision de l'ensemble chimie-transport

Comme cité ci-dessus, la mise en place des différentes conceptions d'ensemble est possible si différentes parties du système numérique de qualité de l'air sont perturbées. D'abord, il faut identifier les conséquences majeures des perturbations introduites dans les résultats pour finalement choisir les plus importantes dans le système opérationnel.

À la suite de la première partie du travail [Rapport de progrès ADEME, Carvalho et al., 2007] on a constaté que les plus importantes perturbations sont causées par les différentes conditions météorologiques, la version du modèle MM5 utilisé et aussi par les conditions imposées aux émissions, paramètres météorologiques calculés dans CHIMERE (coefficient d'atténuation du rayonnement solaire), et conditions chimiques de bord, qui seront décrites a la suite.

Dans ce travail, certains aspects des simulations d'ensemble ont été fixés pour tous les membres, à savoir, les conditions initiales, le domaine, et le mécanisme chimique choisi.

Les conditions chimiques initiales de la troposphère à chaque échéance de prévisions proviennent de la période précédente de simulation de prévision pour la simulation de contrôle. La simulation de contrôle est définie comme celle où la simulation de contrôle PEARP a contrôlé tous les processus de CHIMERE, avec les émissions EMEP calculées comme pour PREV'AIR.

Le domaine spatial pour l'application du modèle CHIMERE est à l'échelle continentale. Il couvre l'Europe de sud, de l'ouest, et une partie de l'Europe centrale, avec une résolution horizontale de 54 km (Figure 4). Le domaine vertical comprend 8 niveaux de pression variables, qui diminuent d'une façon géométrique entre la pression de surface et la pression du sommet, considérée à 500 hPa. C'est pour cette configuration spatiale que les variables météorologiques (calculées par ARPEGE ou MM5) seront interpolées. Le mécanisme chimique choisi est le mécanisme de la configuration de prévisionMELCHIOR2 en y ajoutant le calcul des aérosols.

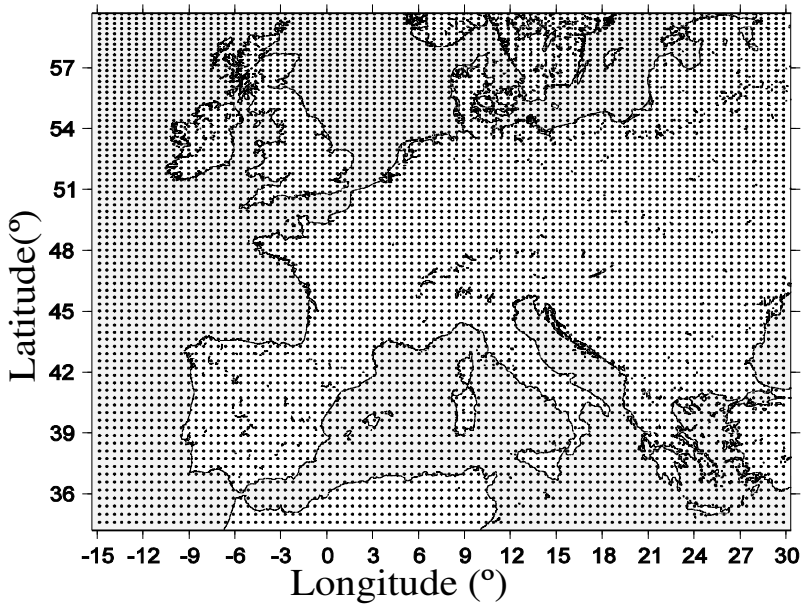


Illustration 4: Domaine CHIMERE continental pour l'application d'ensembles chimie transport.

Quelle que ce soit la chaine de modèles utilisée (ARPEGE-CHIMERE ou ARPEGE-MM5-CHIMERE), les membres de l'ensemble météorologique sont calculés d'abord par le modèle ARPEGE, appelés PEARP, en collaboration avec Jean Nicolau de Météo-France. La prévision des systèmes de qualité de l'air commence à 18H00 UTC à D0, jusqu'à 00H00 de D+3.

Pour les simulations de contrôle des deux chaines implémentées, toute la période entre le 1ère juin et le 29 août a été simulée. A chaque échéance de simulation de contrôle, un fichier était construit après 24 heures de calcul pour servir de conditions initiales chimiques pour l'échéance suivante, et aussi pour tout les membres de l'ensemble chimie transport devant être calculées à cette échéance (Figure 5). Cette méthodologie a été appliquée dans les deux chaines de modèles.

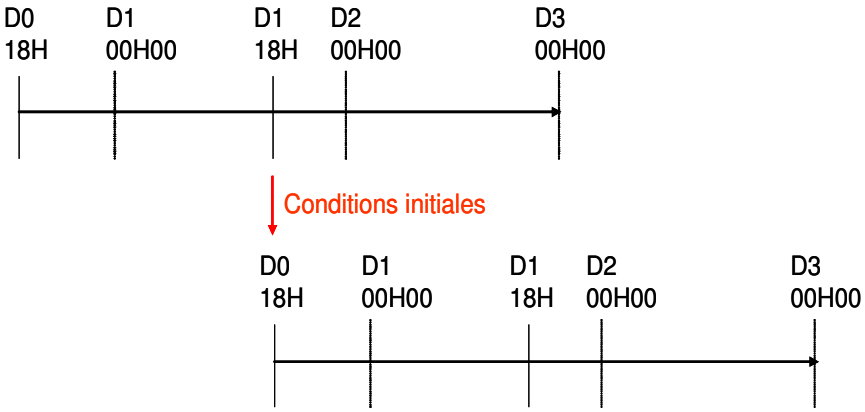


Illustration 5: Construction des conditions initiales pour les échéances de calcul chimie transport.

3.1 Les principes de perturbation de la chaine opérationnelle PEARP basée sur ARPEGE

Depuis juin 2004, Météo-France dispose d'un système de prévision d'ensemble pour la courte échéance (PEARP). Il a été développé plus spécifiquement pour la détection d'événements dangereux comme les cyclogenèses atlantiques et les phénomènes de vent associés.

Ce système comprend 11 prévisions (10 prévisions issues d'états initiaux perturbés et une prévision non perturbée, appelée prévision de contrôle) et utilise le modèle ARPEGE à la même résolution que la version opérationnelle (Troncature T358c2.4, correspondant à 20 km sur la France et 41 niveaux verticaux). Les perturbations des conditions initiales sont élaborées en calculant 16 vecteurs singuliers ciblés sur l'Atlantique Nord et l'Europe de l'Ouest de façon à sélectionner les structures ayant une influence directe sur la prévision à courte échéance sur la France et le proche Atlantique. Le système PEARP est lancé une fois par jour à partir de l'analyse 18h UTC jusqu'à 60 h d'échéances et fournit quotidiennement des produits probabilistes aux prévisionnistes, les informant sur les incertitudes de la situation météorologique.

Le principe de calcul des vecteurs singuliers

Cette méthode s'appuie sur l'hypothèse de croissance linéaire des erreurs durant les 48 premières heures de prévision pour rechercher les directions dans lesquelles ces erreurs seront susceptibles de croître le plus rapidement. Cela se traduit par la recherche des perturbations qui maximisent le ratio:

$$\sqrt{\frac{\langle PM * Mx(t_0), Px(t_0)\rangle}{\langle x(t_0), x(t_0)\rangle}} \qquad \text{(eq. 1)}$$

Où:

M représente le propagateur tangent-linéaire;

<x> est un produit scalaire (énergie totale, énergie cinétique, enstrophie, norme hessienne, entre autres)

P représente un opérateur de projection (qui permet par exemple de ne prendre en compte que l'hémisphère Nord, hors zones tropicales)

Les solutions sont les vecteurs propres de l'opérateur, appelés vecteurs singuliers. Ces vecteurs forment une base orthonormée décrivant les directions les plus instables dans l'état initial.

Vecteurs singuliers "ciblés"

L'opérateur de projection utilisé actuellement dans le calcul des vecteurs singuliers permet d'extraire l'information sur une zone particulière. Il est ainsi possible de restreindre ce calcul sur une zone limitée telle que l'Europe Occidentale ou le proche Atlantique, ce qui permet ainsi de ne conserver que les directions dans lesquelles le taux de croissance des erreurs serait maximum sur cette zone pendant la durée d'optimisation des vecteurs singuliers (Figure 6).

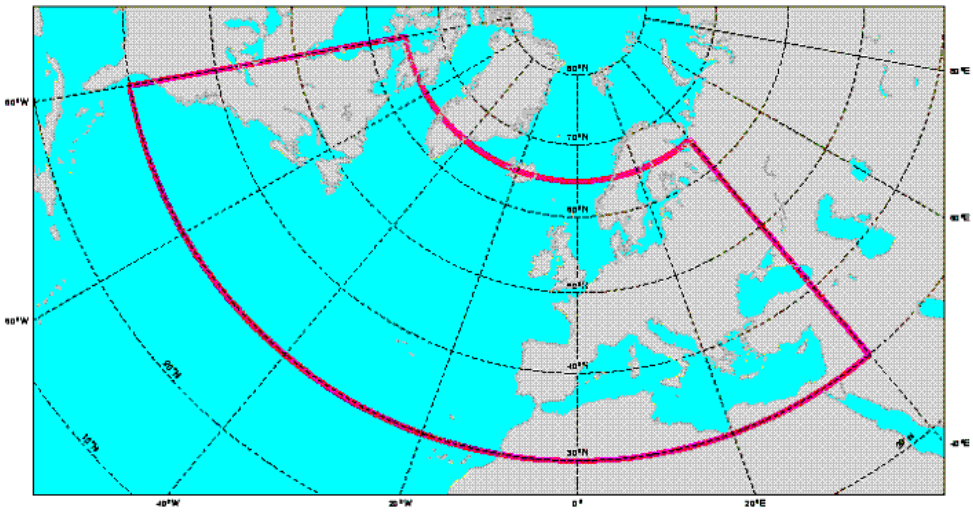


Illustration 6: Zone de ciblage des vecteurs singuliers de la PEARP

3.2 Sources d'incertitudes dans CHIMERE

Les non-linéarités qui existent dans la description physique et chimique de l'atmosphère rendent les modèles numériques sensibles à un certain nombre de facteurs. Comme par exemple, à l'incertitude des conditions initiales, à la prévisibilité atmosphérique, à l'incertitude dynamique, aux mécanismes physiques et chimiques employés pour décrire la réalité à l'intérieur des systèmes modèles [Vautard et al., 2006]. Or, une conception d'ensemble pour les applications à la qualité de l'air a plus de probabilités de fournir des bons résultats si une ou plusieurs types de sources d'incertitudes est incluse et, par conséquent, si différentes parties du système numérique sont manipulées.

Les perturbations introduites en CHIMERE en le présent travail ont été mise en place en se fondant dans les travaux antérieurs de [Menut, 2003] et [Menut et al., 2000], où le modèle adjoint CHIMERE a été utilisé pour analyser les facteurs auxquels CHIMERE se montré le plus sensible.

Pour ce qui concerne la sensibilité de CHIMERE en simulant la concentration maximale journalière d'ozone, il s'est avéré d'une sensibilité positive aux émissions de COV pendant le matin, et d'une sensibilité négative aux émissions de NO. Si on s'intéresse aux secteurs d'activité considérés dans la base de données EMEP, la simulation du maximum d'ozone se montre particulièrement sensible aux secteurs du trafic routier et aux solvants. L'analyse des séries temporelles de sensibilité des concentrations par rapport aux différents paramètres imposés dans CHIMERE a montré que le maximum de O_x au cours de l'après-midi est affecté par les concentrations de polluants NO_X et COV émises pendant le matin.

En regardant les conditions de bord, le modèle a montré une sensibilité positive pour le calcul des concentrations de ozone et d'O_x, pendant l'après-midi, aux valeurs de concentration d'ozone imposées au bord du domaine, ce qui montre l'importance de la base de données utilisée comme condition de bord. Effectivement, c'est le facteur qui semble avoir l'impact le plus important quand l'appréciation est faite en zone urbaine.

D'autres auteurs [Hanna et al., 2001] ont montré que les taux des réactions qui composent les mécanismes chimiques dans les modèles peuvent elles aussi introduire des incertitudes dans les résultats. CHIMERE a indiqué six vitesses de réactions auxquelles ses résultats de concentrations sont plus sensibles; ce sont les réactions où l'oxydation du NO par O_3 et OH est impliquée; les réactions d'équilibre entre l'acétaldéhyde et le NO_2 et l'oxydation du groupe

des composants aromatiques pour le radical hydroxyle. Dans la présente configuration d'ensemble, l'intérêt s'est porté sur la vitesse de photolyse du NO_2, a travers du coefficient d'atténuation du rayonnement solaire dans l'atmosphère.

Les paramètres météorologiques responsables des variations majeures des concentrations de O_3 et O_x (l'après-midi) et de NO_2 (le matin) sont la température, la vitesse du vent et les coefficients de diffusion verticaux.

Un système de prévision d'ensemble fournit une méthode pratique pour produire des prévisions probabilistes des événements de temps. De grand intérêt pour la météorologie sont les événements binaires E, tel qu'un taux de précipitations supérieur à, ou une température inférieure à un seuil donné. Ce genre d'événements sur des applications de qualité de l'air est relié avec les seuils légaux imposés sur certains composés chimiques atmosphériques spécifiques, comme par exemple le seuil de la concentration horaire en ozone pour l'information au public de 180 g m^{-3}. Pour un système d'ensembles donné, la probabilité de prévision de l'occurrence de E est estimé avec la fraction des membres de l'ensemble qui prévoient l'événement sur le nombre total d'ensembles. En raison du temps de calcul en général le nombre de membres d'ensemble doit être limité à quelques dizaines. Alors, le numéro de l'ensemble présente un degré inévitable d'erreur dans le processus d'échantillonnage, de sorte que la probabilité prévue n'est pas toujours représentative de la probabilité fondamentale de E (Richardson, 2001). Le bénéfice de l'augmentation du nombre d'ensembles sur les prévisions des états atmosphériques est discuté, entre autres, dans [Talagrand et al., 1999, Atger, 1999, Richardson, 2001]. La conclusion la plus répandue est que le numéro d'ensemble a une influence sur la valeur moyenne obtenue par l'ensemble, ainsi que sur son habilité à prévoir le temps.

L'habilité d'un modèle à reproduire et prévoir les états de l'atmosphère dépend aussi des caractéristiques du flux atmosphérique. [Kimoto et al., 1992] ont étudié la variabilité temporelle de l'habilité des prévisions opérationnelles de moyen terme avec le modèle global spectral de l'agence météorologique japonaise. Ils ont montré que la valeur de l'erreur quadratique moyenne de la hauteur de la surface à 500 hPa avait un maximum temporel prononcé quand l'atmosphère au-dessus du Pacifique nord a subi une transition remarquable du flux zonal à la situation de blocage pendant l'hiver. Cette transition a été associée à une instabilité de l'atmosphère plus élevée que la moyenne; elle était également visible sur les résultats des modèles au centre météorologique national des USA et au ECMWF. Cette étude a été réalisée en se basant sur les résultats déterministes des modèles. [Toth et al 2001], ont appliqué la technique d'ensemble pour identifier les cas où les probabilités des prévisions qui dépendent du type de flux atmosphérique ont un niveau d'incertitude bas, ou au contraire élevé. A partir de cette étude, ils ont développé un produit de prévisions appelé «mesure relative de prévisibilité» pour identifier des prévisions au-dessous et au-dessus de l'incertitude moyenne. Cette mesure est normalisée selon l'endroit géographique, la phase du cycle annuel, l'échéance, et également la position de la valeur de prévision en termes de distribution de fréquence climatologique. Ce qui a motivé cette démarche se base sur le fait que la dispersion des valeurs d'un système d'ensemble a été suggérée et évaluée comme une façon possible de mesurer les erreurs dûes au type de flux atmosphérique. [Bowler et al, 2007] ont trouvé que sur le domaine Europe et Atlantique Nord (NAE), le système de prévision d'ensemble global et régional du Met Office[1] donne des scores élevés pour le vent a 10 m et la température à 1,5 m, pour une échéance à 30 h. Ces scores montrent que l'ensemble de NAE a des niveaux élevés de corrélation dans la saison d'hiver. Par contre, en été la corrélation est plus faible pour la température.

[1] MOGREPS - conçu pour que des prévisions du temps à court terme puissent être utiles dans l'évaluation de l'incertitude et la génération de produits probabilistes de prévisions à 1-2 jours.

L'affaiblissement du score des modèles de prévision à moyen terme est aussi observable sur les résultats des simulations de contrôle et les simulations probabilistes du Centre européen pour les prévisions météorologiques à moyen terme, (Figure 7). Bien qu'entre 1994 et 2005 les moyennes d'ensemble et la prévision de contrôle ont subi un amélioration, il est aussi évident que la prévision de la moyenne d'ensemble a fait plus de progrès pour diminuer la différence du score entre la saison de l'hiver et de l'été (ECMWF, 2005).

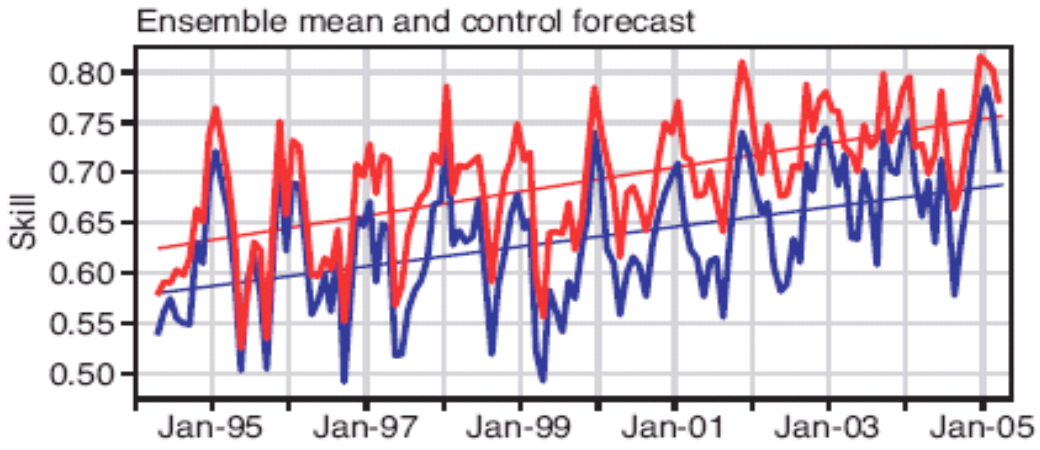


Illustration 7: Figure 7: Le coefficient de corrélation moyen mensuel d'anomalie de la simulation de contrôle (ligne bleue) et de la moyenne de l'ensemble (ligne rouge) des prévisions à 7 jours des champs de hauteur de geopotential à 500 hPa au-dessus de l'hémisphère nord. Les lignes droites montrent des courbes de régression linéaire (ECMWF, 2005).

Vu l'impact du nombre de membres d'ensembles sur les résultats d'un certain modèle, et la facon dont les états de flux atmosphériques affectent la prévisibilité (surtout en été, saison la plus importante pour les applications numériques à la qualité de l'air) il est crucial d'ajuster le nombre d'ensembles météorologiques pour apporter le maximum de sources d'incertitude dues à la météorologie. En plus, il est aussi démontré que le modèle chimie-transport CHIMERE est sensible dans ses résultats à des variations de température, d'intensité de vent et de coefficients de diffusion verticaux.

En se basant sur les arguments exposés ci-dessus, un total de 24 membres d'ensemble a été construit. Dans cette expérience les 11 membres météorologiques d'ensemble calculés par le système de PEARP ont été considérés, ainsi les variations importantes dues aux paramètres météorologiques seront prises en compte. Avec les 11 ensembles météorologiques, toutes les considérations dans le modèle CHIMERE ont été admises comme de contrôle, c'est-à-dire: inventaire des émissions EMEP 2003, 2 niveaux verticaux d'émissions, et les facteurs de discrétisation décrits pour la chaine de prévision IPSL-INERIS-LISA, (2005). Dans le système d'ensembles de chimie transport, les variations d'incertitude dû aux émissions, à la chimie ou à des paramètres en relation avec la chimie ont été introduites dans 13 autres membres associés à la simulation météorologique de contrôle (Figure 8).

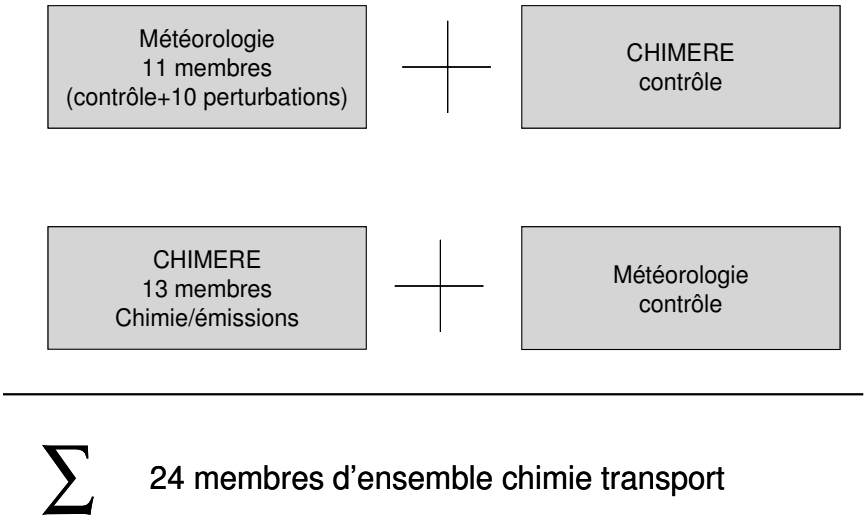


Illustration 8: Figure 8: Situations des simulations de contrôle météorologique et chimique dans le système d'ensemble chimie-transport.

Deux années différentes pour l'inventaire d'émissions EMEP – 2002 et 2003 – ont été choisies. Toutes les perturbations restantes ont comme base l'inventaire d'émissions EMEP de 2003. Des distributions verticales d'émissions ont été prises en compte, considérant différents facteurs de désagrégation entre 2 et 3 niveaux. Puisque les simulations opérationnelles sont plutôt validées avec 2 niveaux verticaux, les perturbations restantes ont été exécutées avec cette considération; À savoir, un décalage de plus ou moins une heure sur les profils horaires pour tous les secteurs d'activité ; perturbations des émissions de VOC pour l'utilisation de solvants (± 40 %, basé sur l'estimation des incertitudes d'émissions prise à partir de [Theloke et Friderich, 2000] et [IPCC, 2006]; les émissions de NO_x du trafic ont été considérées à ± 20 % (Kühlwein, J. et R. Friedrich, 2000). Des perturbations horaires aléatoires sont appliquées aux espèces chimiques gazeuses imposées aux frontières du modèle et au coefficient d'atténuation, qui est calculé dans le préprocesseur diagnostique météorologique de CHIMERE. Finalement, le comportement du trafic les lundis et vendredis, pendant le matin, a été également inclus dans un membre chimique d'ensemble, dans ce cas-ci des facteurs multiplicateurs ont été appliqués entre 5H00 et 8H00 UTC sans considérer la conservation de masse de polluant émise.

La Figure 9 résume toutes les considérations faites pour la construction de l'ensemble chimie-transport, valables pour les deux chaines de modèles testées.

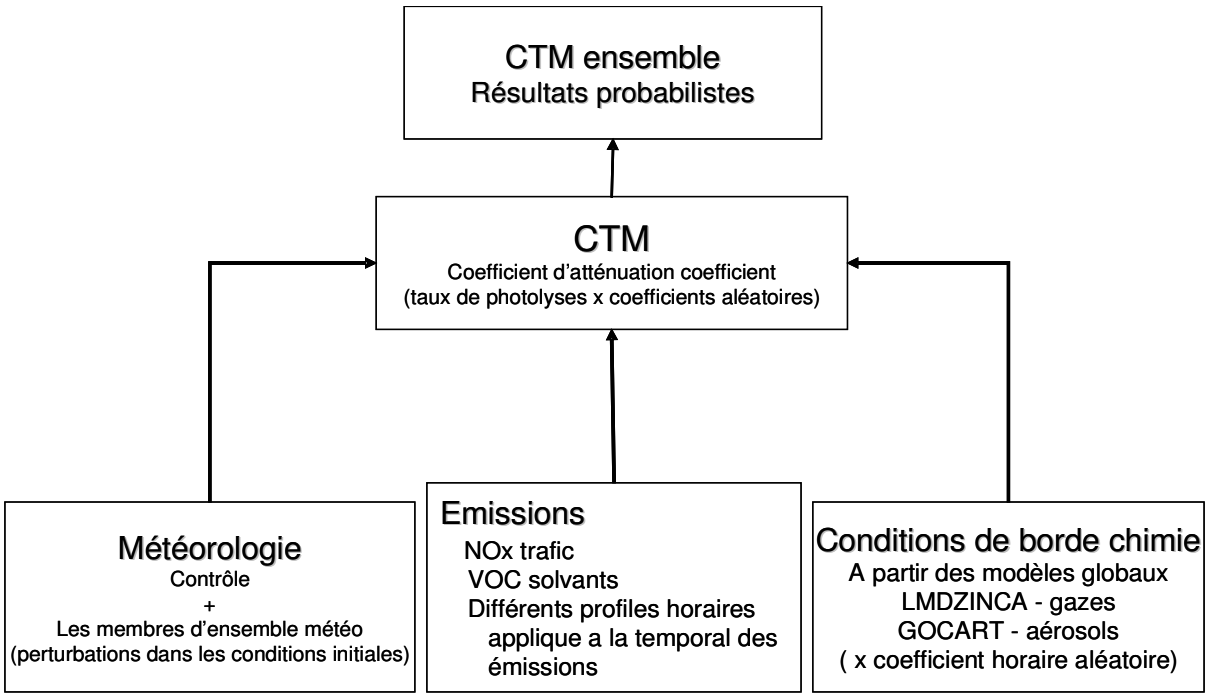


Illustration 9: Changements proposés pour inclure des incertitudes dans des prévisions de qualité de l'air.

3.3 Mise en oeuvre des chaine de modèles ARPEGE-MM5-CHIMERE.

Cette chaine spécifique se sert du modèle MM5 à aire limitée [Dudhia, 1993] pour forcer le modèle CHIMERE. On cherche donc à retrouver l'équivalent de la chaine de prévision actuellement installée à l'INERIS dans le cadre de PREVAIR.

La mise en place de cette chaine pour cette étude a nécessité de revoir certaines composantes numériques, entrainant une péridoe de plusieurs mois spécifiquement dédiée à l'implémentation de ces codes de calculs. Cela concerne particulièrement:

1. le passage de la version 3.6 à la version 3.7 du modèle MM5, afin de profiter pleinement des dernières améliorations du modèle météorologique,
2. la mise en place de la dernière verison de CHIMERE, correspondant à cette période de l'étude à la version parallèle du modèle.
3. Un travail d'interfacage entre les différents formats de données permettant d'utiliser les champs météorologiques d'ARPEGE (notamment la prise en compte du passage au format GRIB1 des données, suivant la norme WMO, http://www.wmo.int/pages/prog/www/ WMOCodes/Guides/GRIB/GRIB1-Contents.html)

Le premier résultat des tests entre les version MM5 3.6 et 3.6 ont montré des différences significatives sur les champs de concentrations d'ozone simulés. Afin de rester consistant avec la configuration de PREVAIR, il a été décidé de consrever la version 3.6 pour ce travail. Une étude aurait pu intégrer ces deux versions comme un « ensemble » possible mais les ressources informatiques demandées par MM5 sont parmi les plus importantes de notre chaine de modélisation et nous avons donc décidé de privilégier d'autres pistes de perturbations d'ensembles.

On a donc pour cette chaine: les ensembles météorologiques produits par le modèle ARPEGE (ARPEGE/MM5), et la version 3.6 du modèle de meso-échelle MM5, avec les développements introduits dans la microphysique des nuages et la couche limite décrits en

Chiriaco et al. (2005). Les autres paramétrisations de la physique dans MM5 sont: Grell pour le cumulus, la description de la couche limite de MRF, le *Rapid Radiative Transfer Model* (RRTM) pour le schéma de transfert radiatif , le processus dans le sol est décrit par un modèle multi-couche et, finalement, le schéma de Reisner Graupel a été adopté pour décrire l'humidité explicite.

3.4 Chaine de modèles ARPEGE-CHIMERE

L'intérêt de forcer directement CHIMERE est de ne pas avoir à utiliser MM5 qui prend 80% des ressources en temps de calcul de l'ensemble de la chaine. Pour réaliser ce « branchement » direct, il a été nécessaire de construire une nouvelle interface informatique de type *interf_[met]* (Figure 2) entre la «base de données» météorologiques ARPEGE et CHIMERE.

Toutes les variables ARPEGE tridimensionnelles ont été prises aux niveaux de pression 1000, 850, 800, 700, 600, 500, 400, 300, 250, 200, 150 et 100 hPa. Ces variables comprennent: la hauteur du géopotentiel, du niveau de pression, la température, les composants zonal et méridional du vent (*v* et *u* respectivement) et l'humidité spécifique. En surface, le modèle ARPEGE fournit la pression superficielle, la température et lh umidité spécifique à 2 m, le vent a 20 m. Les variables reliées aux processus sol-atmosphère sont: la température de la couche du sol jusqu'à 10 cm, le contenu du liquide dans le première centimètre de sol, les flux de chaleur sensible et latent. Les fractions de nuages hauts, moyens et bas ont aussi été prises en compte dans lIn terface *interf_ecm.*

En premier lieu la ltitude des niveaux de pression a été calculée à partir dU n changement d'unités, en divisant les champs de géopotentiel d'ARPEGE par l'accélération de la gravité. La hauteur géométrique du niveau de pression a été finalement calculée par la relation [Stull, 2000]

$$z = \frac{R_0 * H}{R_0 - H} \qquad \text{(eq 2)}$$

où z est la hauteur géometrique; H la hauteur de géopotentiel et R_0 le rayon de la Terre.

Le vent à 20 m était utilisé pour déduire le vent a 10 m, à travers le profil du vent, dans la subroutine *friction_velocity*, source code *diagmet_science.f90*, selon la relation

$$M_2 = M_1 \frac{\ln\left(z_2 z_0\right)}{\ln\left(z_1 z_0\right)} \qquad \text{(eq 3)}$$

où M_1 est la vitesse du vent a z_1 = 20 m, M_2 la vitesse, désirée, du vent a z_2 = 10 m, et z_0 la longueur de rugosité aérodynamique (qui dépend du type d'utilisation du sol, [Stull, 2000]).

Pour calculer l'humidité relative a 2 m avec les données disponibles, il a fallu aussi une petite correction a la formulation: utiliser lh umidité spécifique et pas la température du point de rosée. La température du point de rosée a été calculée comme non intermédiaire avec les variables humidité spécifique, pression et la valeur de la constante entre le ratio entre les constant de gaz pour l'air sec par rapport a la constant de gaz de la vapeur d'eau (ε = 0.622 $g_{vapeur}/g_{air\ sec}$, [Stull, 2000] et [Lawrence, 2005]).

Lb ption de calcul des aérosols dans le modèle CHIMERE impose comme variable obligatoire d'entrée le contenu en eau liquide dans toutes les couches des modèles. Cette

variable a besoin d'un traitement secondaire, pas encore mis au point au début de ce travail. Pour avoir ces résultats dans les simulations CHIMERE une paramétrisation s'imposait. Quand le champ de fraction de nuage était supérieur a 50 %, la température de la cellule de la maille du modèle est considérée comme la température dans un nuage [Lemus et al., 1997],

$$Contenued'eauliquide = 0{,}127 + 6{,}78\,x\,10^{-3}\,xT_c + 1{,}29\,x\,10^{-4}\,xT_c^2 + 8{,}68\,x\,10^{-7}\,xT_c^3 \quad (g\ m^{-3})$$

(eq 4)

Finalement, pour obtenir les unités demandées par CHIMERE (kg/kg) un calcul de la masse volumétrique de l'air humide est calculé, en divisant par le contenu d'eau liquide trouvé par l'expression 3.

4. Périodes de simulation

Selon un rapport de l'Union Européenne [EEA, 2007] sur la qualité de l'air, les concentrations d'ozone sur l'Europe ont été élevées durant Juillet 2006 en raison de la situation météorologique de blocage favorable a la production photochimique. En revanche entre avril-mai 2006 et, plus tard, entre août et septembre, les températures ont été plus basses et la fréquence de dépassement du seuil d'information publique (180 g m^{-3}) a diminué partout en Europe.

En particulier, c'est en France méridionale, Allemagne, Espagne, Portugal, Romania, Royaume Uni, différents endroits sur le Benelux, la Grèce, Slovénie et Macédoine que les dépassements du seuil d'information publique ont été plus fréquemment mesurés. En France il y a eu des mesures d'ozone supérieures à 300 mg m^{-3}.

L'épisode d'ozone le plus important sur l'Europe s'est produit entre le 17 au 28 juillet. Cette période a été caractérisée par une puissante dorsale en altitude s'étendant du Maroc aux iles Britanniques; en surface les températures sont restées élevées jusqu'au 22 juillet; presque toutes les régions de la France ont subi des températures bien au-dessus de 30 ºC (des maximales de 39ºC ont été enregistrées le 21 juillet, voir Tableau 1). Les successions de talweg, vérifiées sur la charte de pression de 500 hPa le 21 et 23 juillet, ont été responsables d'une baisse des températures en surface le 23 et 24 juillet [Météo-France, 2006a 2006b] et par conséquent du nombre de dépassements du seuil d'information. Une hausse des températures a été observée entre le 25 et le 28 juillet. C'est le 26 juillet ou les records de températures sont les plus nombreux, ce qui correspond à l'un des pires scénarios de mesures de concentration d'ozone sur la France et l'Europe (Figure 11), avec un numéro appréciable de stations ayant enregistré des concentrations plus élevées que le seuil d'alerte a la population (supérieures a 240 g m^{-3}).

Tableau 1: Records mensuels de température maximale (après-midi) relevés en juillet 2006 (URL 6).

Ville	Date	Température max (ºC)
Avignon	31 juillet	38,0
La Perthus	27 juillet	37,6
Lauterbourg	27 juillet	35,6
Limoges	26 juillet	37,6
Nemours	26 juillet	37,9
Blois	26 juillet	37,2
Issoudun	26 juillet	38,6
Vierzon	26 juillet	37,4
Sancerre	26 juillet	38,0

Guéret	26 juillet	35,9
Montluçon	26 juillet	39,1
Tours	26 juillet	37,3
Issoudin	25 juillet	37,8
Blois	25 juillet	36,5
Sancerre	21 juillet	36,3
Pouilly-en-Auxois	21 juillet	35,4
Parthenay	21 juillet	37,6
Cairanne	21 juillet	39,1
Evreux	19 juillet	35,8
Roissy	19 juillet	36,4
Rouen	19 juillet	34,8
Saint-Quentin	19 juillet	35,9
Troyes	19 juillet	37,0
Lisieux	19 juillet	36,2
Dunkerque	19 juillet	38,2
Le Touquet	19 juillet	36,2
Calais	19 juillet	37,0
Courbevoie	19 juillet	37,5
Argenteuil	19 juillet	38,5
La Roche-Sur-Yon	18 juillet	36,6
Landivisiau	18 juillet	33,9
Lorient	18 juillet	34,9
Saint-Nazaire	18 juillet	36,2

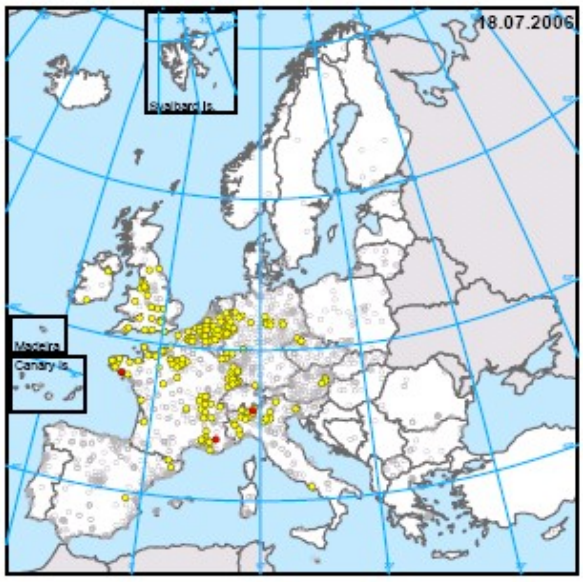


Illustration 10: Situation synoptique le 18 juillet 2006

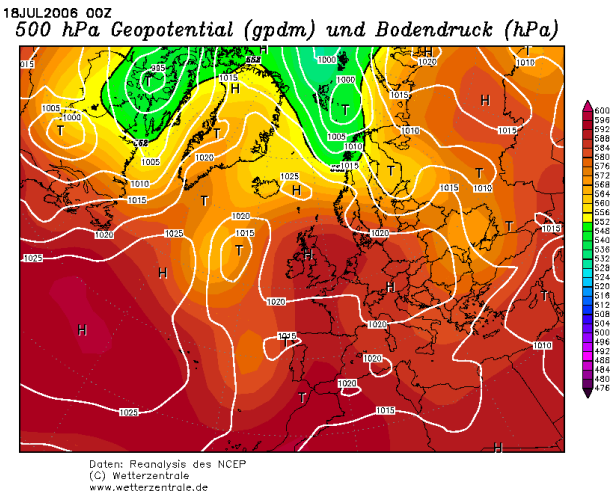


Illustration 11: concentrations d'ozone mesurées en microg/m3 (code couleur points: blanc: [O3] < 180; jaune: 180< [O3]<240, rouge: [O3] > 240.

a) b)

Le 18 juillet, les stations mesurant des valeurs supérieures a 180 g m^{-3} sont moins nombreuses (Figure 10), mais le positionnement de la nticyclone sur les Îles Britanniques fait que les mesures de concentrations d'ozone élevés y sont plus marqués. Le 26 juillet (Figure

11), des concentrations d'ozone élevés sont observés proche de l'Europe centrale, au Nord-est de l'Italie et sur la Croatie.

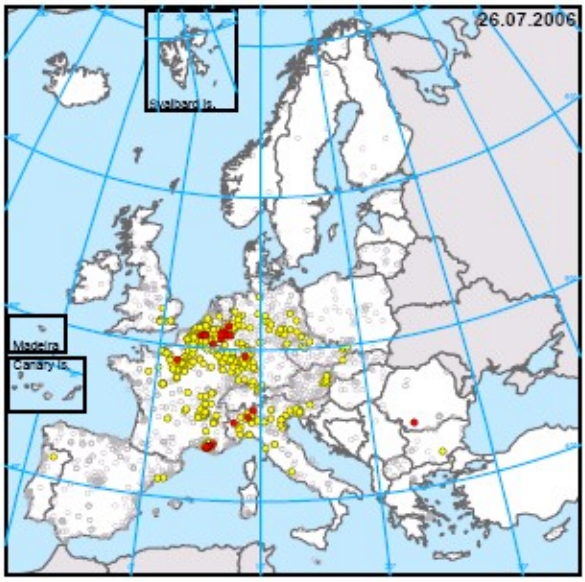


Illustration 12: Situation synoptique le 26 juillet 2006

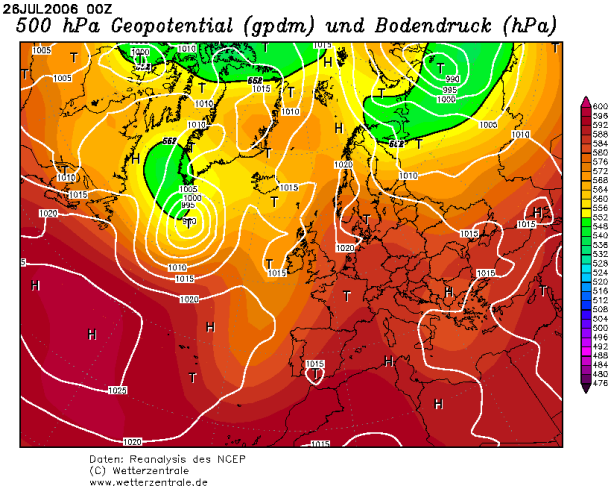


Illustration 13: concentrations d'ozone mesurée (en microg/m3)

a) b)

Comme période de production intense d'ozone sur l'Europe de l'ouest et d'intérêt pour la simulation d'ensemble, c'était la période entre le 16 et le 29 juillet qui a été choisie pour les calculs avec les deux chaines de modèles.

Une période de production photochimie faible a été simulée avec l'approche d'ensemble au début de juin, entre le 1 et le 9 juin. Entre le 1er et 3 juin le temps a été influencé par le déplacement en Europe de l'ouest, sur la partie Est de la France, d'une goutte froide, qui a apporté de l'activité dans la troposphère, et a amené de l'air plutôt frais. La situation anticyclonique présente le 4 et le 9 juin, est associée a des faibles dorsales en altitude, jusqu'au 9 où la dorsale augmente en intensité et la température monte sur tout le pays [Météo-France, 2006c 2006d].

5. Résultats et discussions

Le résultat central concerne le polluant photochimique le plus critique en termes de santé publique pendant l'été, l'ozone. Pour compléter l'analyse plusieurs interfaces de calcul on été faites. Depuis son introduction en 2003, le système PREVAIR a subi un processus d'évaluation jusqu'à 2006 [Honoré et al., 2008]. La vérification des prévisions désigne le processus de déterminer la qualité des prévisions. Il existe une grande variété de procédures de vérification, mais toutes mesurent le rapport entre le résultat de la prévision et l'observation correspondante. Quelle que soit la méthode de vérification, elle comprend forcément plusieurs paires prévisions-observations [Wilks, 1995].

Le score du modèle CHIMERE a été calculé à travers des trois indices statistiques, l'erreur quadratique moyenne (*RMS*), l'erreur de biais moyen (*BIAS*), et le coefficient de corrélation (*COR*), comme première approche.

Le *BIAS* est la somme des résultats du modèle (*M*) moins les observations (*O*) divisées par le nombre d'observations, à chaque endroit (*N*). Le *BIAS* est la moyenne des écarts du modèle par rapport aux données; Si le *BIAS* est positif le modèle surestime les valeurs observées, s'il est négatif il les sous-estime. L'erreur de biais moyen est exprimée dans la même unité que les observations,

$$BIAS = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(M_i - O_i)\ . \qquad \text{(eq. 5)}$$

La RMS, l'erreur quadratique moyenne fournit une indication de la précision du modèle, et de sa compétence pour simuler la grandeur de concentration en ozone mesurée. Elle est ici calculée sur toutes les valeurs disponibles c'est à dire à pas horaire.

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(M_i - O_i)^2} \qquad \text{(eq. 6)}$$

La statistique la plus employée pour mesurer la similitude entre la forme des résultats d'un modèle et les observations est le coefficient de corrélation (*COR*). Le terme «forme» est ici employé dans son sens générique. Les deux champs en cours d'évaluation ont la même forme de variation centrée si le coefficient de corrélation est positif. Le COR doit alors être compris entre 0 et 1; les résultats sont parfaitement corrélées avec les observations si *COR* = 1; si *COR* = 0, il n'y a aucune corrélation linéaire entre prévisions et observations. Dans le cas ou *COR* = -1, les prévisions sont parfaitement anti-corrélées avec les observations. On considère en général que seules les prévisions corrélées (ou anti-corrélées a plus de 0,3-0,4) avec les observations sont susceptibles d'apporter une information utile [Delmas et al., 2005]. Cependant, il n'est pas possible de déterminer si les deux formes ont la même amplitude de variation à partir seulement de la connaissance du coefficient de corrélation d'où le besoin de calculer le RMS et le BIAS.

$$COR = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left(O_i - \bar{O}\right)\left(M_i - \bar{M}\right)}{\sqrt{\sigma_O}\sqrt{\sigma_M}} \qquad \text{(eq. 7)}$$

Afin d'avoir une mesure robuste de la valeur centrale de la distribution simulée de concentration à chaque endroit, les résultats des modèles ont été évalués en comparant la médiane de tous les ensembles obtenus à chaque station.

La base de données de stations pour les mesures horaires d'ozone comporte plusieurs pays européens : la France, le Royaume-Uni, la Belgique, le Suisse, les Pays Bas, l'Allemagne, la République Tchèque et l'Espagne. Malheureusement, pendant la période en cours d'évaluation l'information de la plupart de ces pays n'est pas présente et seulement la France et l'Allemagne sont représentées dans les résultats de cette étude.

Les tableaux 1 à 3 récapitulent la distribution des valeurs calculés de *RMS*, de *COR* et de *BIAS*. Le nombre de stations peut changer selon la présence ou l'absence des données mesurées. La capacité du modèle a été évaluée en considérant la classification de la station de mesure rurale, périurbaine et urbaine.

Le système de modèles de qualité de l'air tend à présenter une grandeur d'erreur quadratique moyenne entre 30 et 40 mg m^{-3} pour tous les type de stations. Il est à noter que ces valeurs sont plus élevées que ce qui est couramment utilisé comme indicateur car on calcule ici la RMSE sur toutes les valeurs horaires d'une journée et pas uniquement sur les pics diurnes. La deuxième classe d'erreur la plus fréquente correspond à l'intervalle de

concentrations entre 40 et 50 g m^{-3} à D+1 (premier jour de prévision) et à D+2 (deuxième jour de prévision) pour des endroits urbains et périurbains. Globalement, c'est pendant D+2 sur les endroits ruraux que le système présente les valeurs de RMS les plus petites, c'est-à-dire, où le modèle prévoit la meilleure magnitude de la concentration dans la zone atteinte.

Classe	RURAL				PURB				URB			
	%		#		%		#		%		#	
	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2
10 < RMS < 20	4,9	4,9	4,0	4,0	4,4	5,1	3,0	3,0	-		-	
20 < RMS < 30	20,7	**25,6**	17,0	**21,0**	22,1	22,0	15,0	13,0	15,3	15,3	9,0	9,0
30 < RMS < 40	**48,8**	**43,9**	**40,0**	**36,0**	**33,8**	**37,3**	**23,0**	**22,0**	**47,5**	**44,1**	**28,0**	**26,0**
40 < RMS < 50	**22,0**	22,0	**18,0**	18,0	**27,9**	**27,1**	**19,0**	**16,0**	**25,4**	**30,5**	**15,0**	**18,0**
50 < RMS < 60	3,7	2,4	3,0	2,0	11,8	8,5	8,0	5,0	8,5	10,2	5,0	6,0
60 < RMS < 70		1,2		1,0					3,4		2,0	

Table 1: Distributions des valeurs RMS (mg/m3) calculées pour les stations périurbaines (PURB), urbaines (URB) et rurales (RUR) pour les jours de prévision D1 et D2 (où : % - pourcentages et nombre de # de stations).

Classe	RURAL				PURB				URB			
	%		#		%		#		%		#	
	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2
0.1 < COR < 0.2		1,2		1,0								
0.2 < COR < 0.3	1,2		1,0		-					1,7		1,0
0.3 < COR < 0.4	1,2	1,2	1,0	1,0	-	4,4		3	1,7	1,7	1,0	1,0
0.4 < COR < 0.5	1,2	3,7	1,0	3,0	2,9	2,9	2,0	2,0	8,5	1,7	5,0	1,0
0.5 < COR < 0.6	12,2	11,0	10,0	9,0	4,4	2,9	3,0	2,0	5,1	16,9	3,0	10,0
0.6 < COR < 0.7	**22,0**	**23,2**	**18,0**	**19,0**	5,9	8,8	4,0	6,0	**30,5**	**35,6**	**18,0**	**21,0**
0.7 < COR < 0.8	**42,7**	**45,1**	**35,0**	**37,0**	**48,5**	**61,8**	**33,0**	**42,0**	**45,8**	**33,9**	**27,0**	**20,0**
0.8 < COR < 0.9	19,5	14,6	16,0	12,0	**38,2**	**19,1**	**26,0**	**13,0**	8,5	8,5	5,0	5,0
0.9 < COR < 1.0	-		-		-		-		-			

Table 2: Distributions des valeurs COR calculées pour les stations périurbaines (PURB), urbaines (URB) et rurales (RUR) pour les jours de prévision D1 et D2 (où : % - pourcentages et nombre de # de stations).

Classe	RURAL				PURB				URB			
	%		#		%		#		%		#	
	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2	D1	D2
-60 < BIAS < - 50		1,2		1,0					1,7		1,0	
-50 < BIAS < - 40	1,2		1,0		2,9	1,5	2,0	1,0	5,1	3,4	3,0	2,0
-40 < BIAS < - 30	3,7	3,7	3,0	3,0	20,6	18,2	14,0	12,0	13,6	16,9	8,0	10,0
-30 < BIAS < - 20	11,0	9,8	9,0	8,0	**2 7,9**	**3 3,3**	**1 9,0**	**2 2,0**	**2 0,3**	**2 0,3**	**1 2,0**	**12,0**
-20 < BIAS < - 10	**3 2,9**	**3 7,8**	**2 7,0**	**3 1,0**	**2 7,9**	**2 7,3**	**1 9,0**	**1 8,0**	18,6	16,9	11,0	10,0
-10 < BIAS < 0	**3 5,4**	**3 1,7**	**2 9,0**	**2 6,0**	13,2	16,7	9,0	11,0	16,9	**2 2,0**	10,0	**13,0**
0 < BIAS < 20	15,8	15,9	13,0	13,0	4,4	3,0	3,0	2,0	**2 3,7**		**1 4,0**	12,0
20 < BIAS < 40					2,9		2,0					

Table 3: Distributions des valeurs BIAS (mg/m3) calculées pour les stations périurbaines (PURB), urbaines (URB) et rurales (RUR) pour les jours de prévision D1 et D2 (où : % - pourcentages et nombre de # de stations).

Les scores de *BIAS* (Tableau3) servent à comprendre si et où le modèle prévoit les concentrations en ozone au-dessus ou en-dessous des valeurs mesurées. La déviation entre les résultats modèles et les observations indiquent qu'il y a surtout une sous-estimation des valeurs des concentrations d'ozone mesurées. Cette sous-estimation peut atteindre -60 g m^{-3}. En revanche, le nombre de stations où le système de prévision sous-estime les concentrations est faible, avec un dépassement égal ou inferieur à +40 g m^{-3}. Seules 2 stations dans le domaine sous-estiment la concentration entre 20 et 40 g m^{-3}.

La résolution du maillage choisie pour cette application (cellule de maille de 54 km) est le facteur responsable pour le fait que sur les endroits où se trouvent 84 % des stations le modèle présente des erreurs entre 20 % pour le premier jour de prévisions. Par contre, le modèle sous-estime par -30 et -20 unités de concentration les valeurs de concentration d'ozone mesuré sur la plupart des endroits périurbains analysés. Sur les sites urbains, le système de qualité de l'air ou bien les sous-estime (erreurs aussi entre 30 et -20 g m^{-3}) ou il les surestime entre 0 et 20 g m^{-3}. Les différences trouvées entre les résultats obtenus pour les jours de prévisions D+1 et D+2 ne semblent pas très significatives pour ce paramètre.

Le système de modèles reproduit mieux les valeurs maximum et minimum de l'ozone mesurées par les stations périurbaines (Tableau 1). Sur les endroits ruraux et périurbains les valeurs de *COR* se trouvent plus fréquemment entre 0,6 et 0,8. La dégradation de la prévision pour le deuxième jour de prévision (D+2) est évidente pour les emplacements périurbains ; le pourcentage des coefficients de corrélation entre 0.7-0.8 augmente.

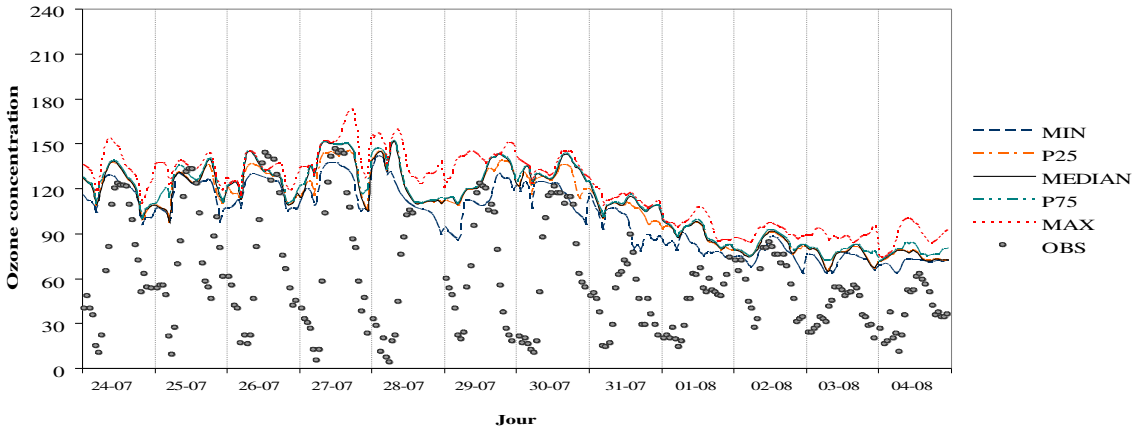
Les séries temporelles d'ozone résultats de l'approche d'ensemble ont été comparées avec les mesures sur les sites urbain (les endroits ou le nombre d'individus sur l'influence des dépassements est plus nombreux) où le modèle a eu les meilleurs et les pires coefficient de corrélation, pour le D+1 de prévision (Figure 12). C'est sur la station de Chamonix Mont Banc que le score de *COR* (0,38) est le plus bas. Ceci s'explique car le modèle n'est pas capable de reproduire les variations diurnes observées. D'abord l'amplitude du cycle diurne simulé est au maximum de 60 g m^{-3}, en revanche, les observations dans la même période indiquent des amplitudes qui peuvent atteindre 150 g m^{-3}. Ce sont, en particulier, les valeurs minimum qui se produisent pendant la nuit et avant l'aube qui ne sont pas calculées. Plusieurs facteurs peuvent contribuer à ces résultats: il y peut avoir une sous estimation des émissions urbaines sur cette région de Haute Savoie et/ou étant donné que c'est une station urbaine de montagne le modèle impose des concentrations d'ozone plus élevées par le transport et les conditions de bords. Dans la moitié des jours la distribution de l'ensemble des résultats modelés est proche

des valeurs maximales journalières mesurées, surtout dans la première partie de la période où les conditions sont plus favorables a une augmentation d'ozone.

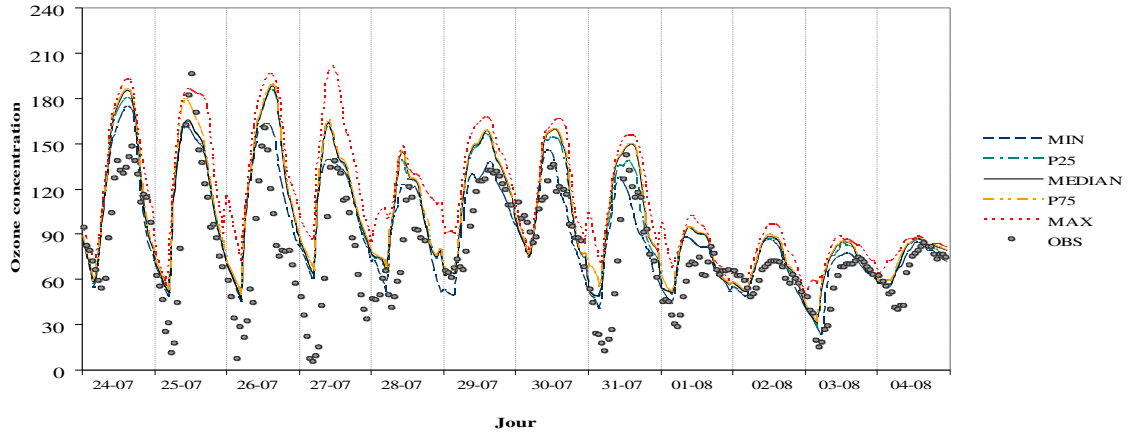
La station de Le Pontet, appartenant au Réseau de surveillance de la qualité de l'air de AIRMARAIX, présente aussi une valeur faible pour le *COR* (0,46) mais les amplitudes des cycles diurne sont mieux reproduites. Cependant, quand les minima d'ozone observés sont faibles, le modèle n'est pas capable d'atteindre leurs valeurs. Mais sur cet endroit la distribution des résultats suit les valeurs maximales pendant le jour dans toute la période de simulation analysée.

Comme contre exemple, Chartres – Fulbert est la station de type urbain qui a le deuxième valeur la plus élevée calculé, score *COR* (0,83). C'est une région qui est placée au sud-ouest de l'Île de France et qui en général est traversée par le panache d'ozone produit par les émissions de Paris et ses entourages. Les variations diurnes d'ozone mesurées, maximales et minimales, sont bien suivies par la prévision. Comme à Le Pontet, la dispersion des valeurs des membres d'ensemble est plus marquée dans les 5 premiers jours de simulation. En particulier c'est le 27 et 28 juillet où la distribution des valeurs des membres d'ensemble est plus large.

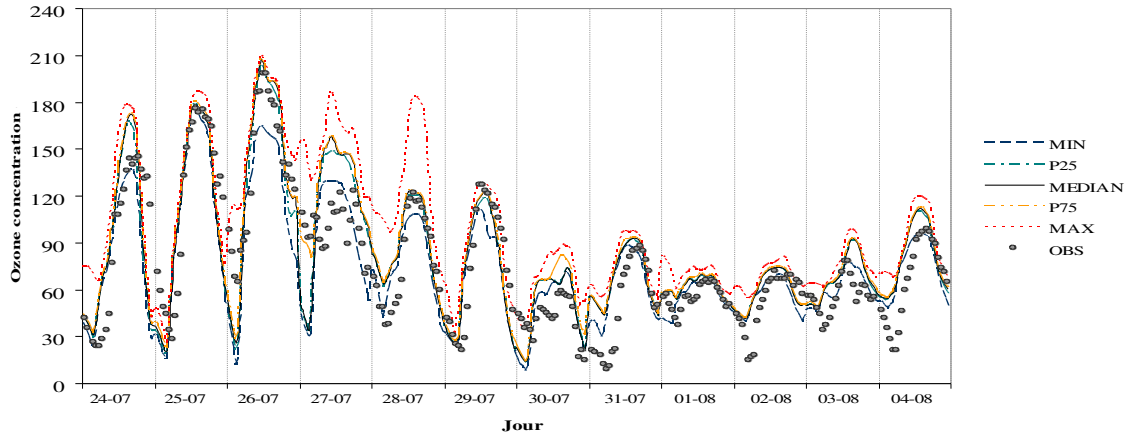
Prés de la station urbaine de Paris – Les Halles (Figure 13), les valeurs maximales mesurées se trouvent en général dans la distribution de valeurs de concentrations simulées. Dans cette station urbaine, les variations diurnes d'ozone sont bien reproduites par l'ensemble des résultats. Ce qui s'observe à Paris, à Chartres et Le Pontet, c'est que le modèle a une inertie sur la production d'ozone au cours des jours 27 et 28 de juillet. Par contre, sur Chamonix cette inertie est accompagnée d'une augmentation des concentrations mesurées. Il serait intéressant de vérifier dans un future travail si cette inertie peut être due aux valeurs imposées aux conditions de initiales, ou si la atmosphère est enrichie en ozone dans les hautes couches (Chamonix, par exemple, est une station de haute altitude), et si l'apport de cet ozone d'altitude dans la couche limite est surestimée par le modèle.



a) Chamonix Mont Blanc



b) Le Pontet



c) Chartres - Fulbert

Table 4: Comparaison entre les séries temporelles d'ozone résultats de l'approche d'ensemble et les observations sur des stations de type urbain (a), et (b) bas scores COR (c) haute score COR.

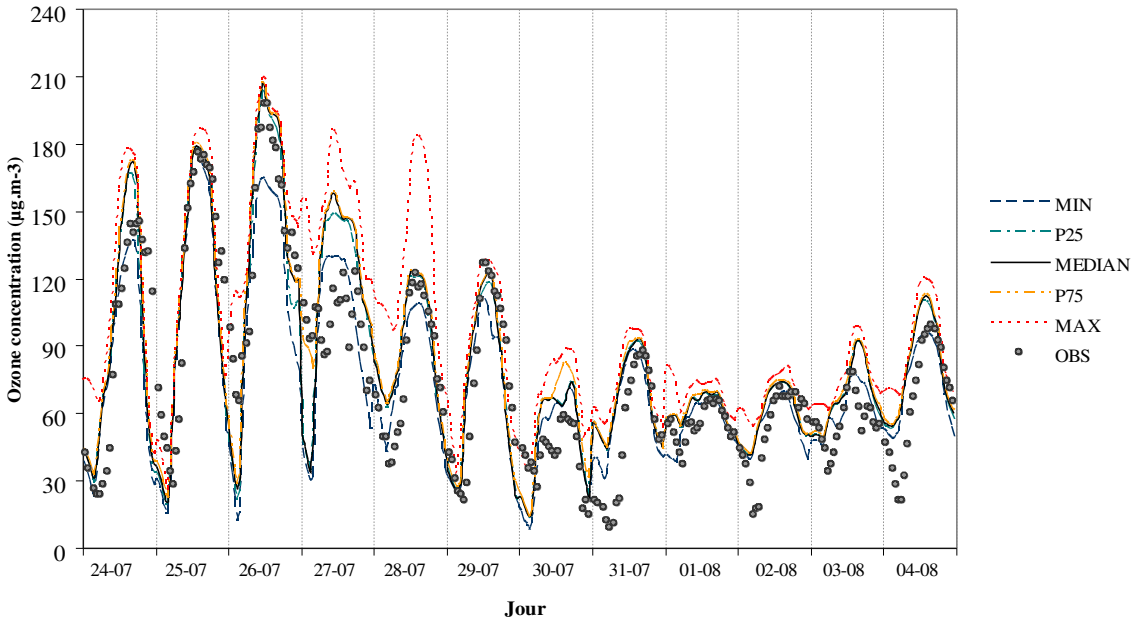


Illustration 14: Paris 1èr arrondissement – Les Halles.

La Figure 15 montre la probabilité de dépassement du seuil d'information au public sur la station des Halles et l'heure a laquelle il va se produire. On remarque qul l y a une différence entre les jours de prévision 24 et 25 de juillet et le 26-27 de juillet. La probabilité de dépassement du seuil dln formation est très faible pendant la deuxième période de simulation. En termes de mesures de mitigation d'émissions il est nécessaire dà voir une connaissance de lI mplication de ce résultat. Le 24 de juillet montre une grande cohérence dans les membres de l'ensemble, lorsque la probabilité dà voir une concentration dò zone supérieure a 180 g m^{-3} est 100 % ou proche de 100 %. La prévision pour le 25 juillet est un bon exemple d'un long période ou on peut attendre des concentrations très élèvées au centre de Paris.

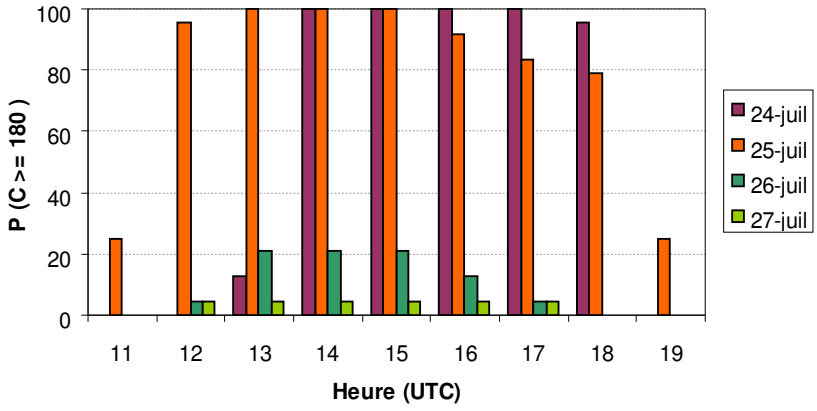
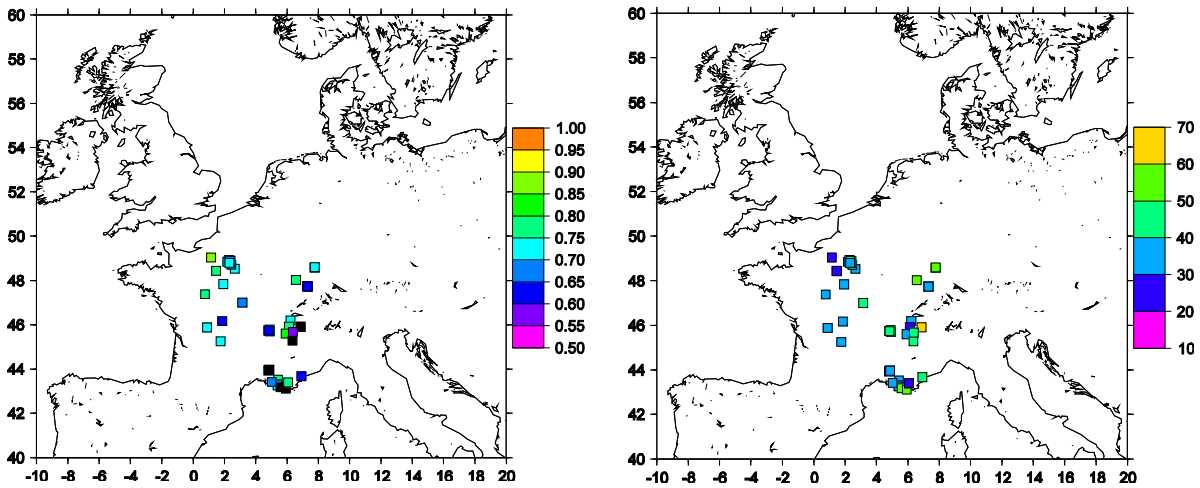
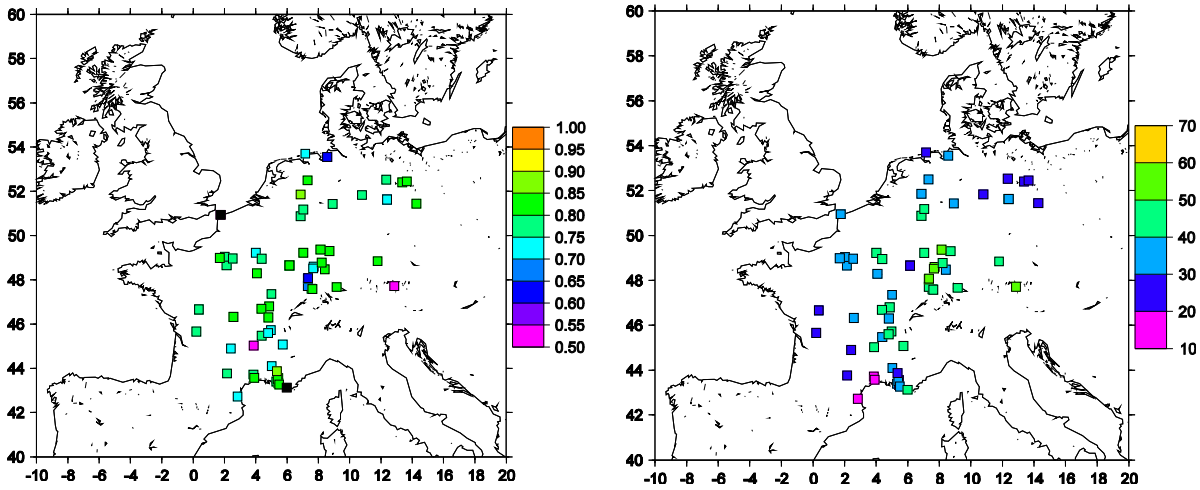


Illustration 15: Figure 14: Probabilité de dépassement du seuil d'information au public sur la station Paris 1er arrondissement – Les Halles.



a) Stations Urbaines



b) Stations peri-urbaines

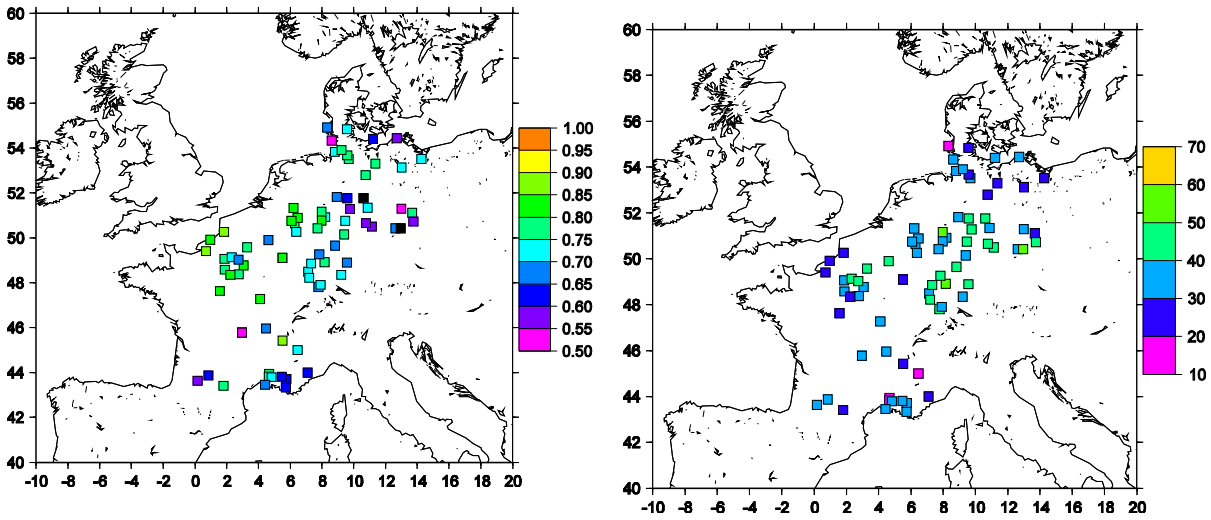


Illustration 16: Coefficient de corrélations (à gauche) et erreur quadratique moyenne (RMS, à droite) des concentrations d'ozone pour le première jour de prévisions (D1), stations a) Urbains, b) peri-urbains et c) ruraux.

c) Stations Rurales

Concernant la distribution spatiale des coefficients corrélations de coefficient obtenus pour le D1 et D2 de prévision (Figure 16), pendant le même période analyse précédemment, sur les endroits ruraux, le modèle ne peut pas reproduire des valeurs maximum et minimum de la série chronologique la plupart du temps au-dessus de la région du nord et Central-orientale de l'Allemagne. La région d'Auvergne et les Pyrénées méditerranéens sont les régions de la France où les coefficients de corrélation ont également des résultats avec des valeurs inferieures à 0,5. Il est observable une détérioration de les deux indicateurs de la qualité des simulations entre le première et le deuxième jour de prévisions. Les stations périurbaines côtières de Calais et de Marseille présent des corrélations inferieures à 0,5. Les stations urbaines situées sur la valle du Rhône, plutôt sur le borde des Alpes, que les pires scores pour *COR* se trouvent.

Bien que les coefficients de corrélations obtenus sur le réseau de stations ruraux d'A IRMARAIX et les Alpes Cote d' Azur montrent valeurs entre 0,60 et 0,80, c'est sur ces locaux de mesures que le modèle montre les plus basses erreurs quadratique moyenne, entre 10 et 20 g m^{-3}. Les stations périurbaines localisées sur l'axe du sud-ouest de la France jusqu'à bassin méditerranéen, aussi que les endroits situes au Nordeste de l'A llemagne, ont des valeurs de RMS les plus bas, entre 10 et 30 g m^{-3}. Cet intervalle de valeurs d'erreurs est remarquables pour les stations rurales sur la même région d'A llemagne et en France sur la région de Pais de Calais.

Tables d'éventualité

Les tables d'éventualité sont des méthodes flexibles qui peuvent être employées pour estimer la qualité des résultats des systèmes déterministes et probabilistes de prévision qui expriment ces résultats en mode continu, catégorique, ou binaire. Sous leur forme plus simple, les tables d'éventualité indiquent la qualité des résultats d'un système de prévision en considérant sa capacité de prévoir correctement l'occurrence ou la non-occurrence des événements prédéfinis qui sont exprimés en termes binaires. Par exemple, l'occurrence de précipitation peut être représentée sur une plage binaire en définissant un événement si la précipitation se produisait, et un non-événement s'il n'y avait aucune précipitation.

Des données qui typiquement sont mesurées dans le format continu peuvent être réduites à un rapport binaire, par exemple, définir si les précipitations d'une saison se sont produites au dernier tiers des totaux saisonniers climatologiques. De même, la prévision est réduite à un rapport binaire si on s'attend à ce que l'événement défini se produise. Un avertissement, W, est défini comme prévision d'un événement, E, qui se produit. Pour des prévisions probabilistes, les avertissements sont publiés quand la probabilité de prévision d'une occurrence d'événement excède un seuil prédéfini [Mason et Graham, 1999]. Ceci est le cas en contamination atmosphérique où, spécifiquement pour l'ozone, il y a deux seuils de concentrations horaires définis par la directive européenne 2002/3/EC du 12 février 2002 relative à l'ozone dans l'air ambiant à prendre en compte: concentrations supérieures à 180 g m^{-3}, niveau dIn formation au public, et 240 g m^{-3}, niveau d'alerte au public.

Une table d'éventualité peut être construite pour un système binaire comme celui illustré dans le tableau 5. Pour un nombre total dO bservations N, si lE vénement est observé et simulé c'est un vrai positif (TP), s'il est observé et pas simulé, sE st un faux négatif (FN), sIl est simulé et non observé, c'est un faux positif (FP) et, finalement, si lE vénement n'est ni simulé ni observé c'est un vrai négatif (TN).

	Prévision		
Observation	Information	Non-Information	Total
Evénement	TP	FN	E
Non-événement	FP	TN	E'
Total	W	W'	N

Table 5: table d'éventualité pour la classification du résultat dU n événement binaire.

Les scores les plus souvent utilisés qui peuvent être calculés a partir de ce tableau sont: le taux de succès (Hit Rate - HR - en anglais), le taux de fausse alarme (False alarme rate, FAR, an anglais) et la précision (Accuracy, ACC) - calculés a partir des expressions suivantes:

$$HR = \frac{TP}{(TP+FN)} \qquad \text{(eq. 8)}$$

$$FAR = \frac{FP}{(FP+TN)} \qquad \text{(eq. 9)}$$

$$ACC = \frac{TP+TN}{\left(TP+FN+FP+TP\right)} \qquad \text{(eq. 10)}$$

A partir des résultats obtenus pour le HR et pour le FAR il est possible de construire un graphe appelé courbe caractéristique de fonctionnement relatif (Relative Operating Characteristic, ROC an anglais).

Ces indices ont été calculé pour la chaine ARPEGE-MM5-CHIMERE, pour les trois types de classifications de stations, pour des dépassements de concentration d'ozone de 180 g m^{-3}, pendant la période de prévisions initialisée le 23 juillet jusqu'au 30 Juillet, où se trouve l'épisode d'ozone sur l'Europe avec le plus grand nombre de dépassements du seuil d'alerte (le 26 juillet, Figure 11).

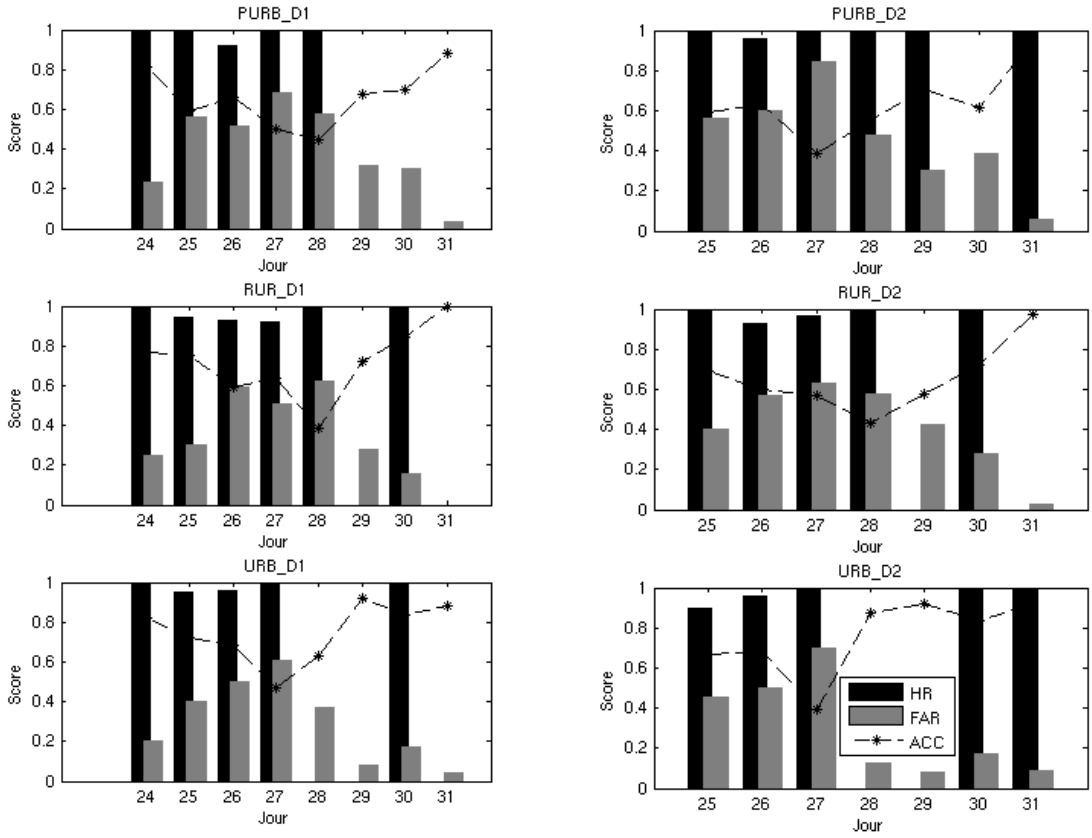


Illustration 17: Figure 16: Evolution temporelle des scores ACC, HR et FAR, pour le jour D+1 (à gauche) et D+2 (à droite) de prévision avec la chaine ARPEGE-MM5-CHIMERE.

Le taux de succès dans la simulation d'un avertissement de dépassement du seuil d'information est très élevé pendant le 24 et le 31 juillet (Figure 17), toujours supérieur à 0,9. Quand des concentrations d'ozone supérieures à 180 mg m^{-3} sont mesurées, le système de simulation de la qualité de l'air est bien ajusté, indépendamment de la classification des stations évaluées. Par contre, quand la situation est favorable a la production photochimique, les taux de fausse alarme augmentent aussi. Le système de modèles est cohérent en donnant un nombre plus élevé de faux avertissement du niveau d'information au public pour le 27 juillet, sauf aux endroits périurbains.

Dans les graphiques de ROC bidimensionnels, le HR est tracé sur l'axe des ordonnées et FAR est tracé sur l'axe des abscisses. Un graphique de ROC peut être utilisé pour décrire des différences relatives entre les avantages (vrais positifs) et les coûts (faux positifs) (Fawcett, 2004).

Un classificateur discret est défini comme ce qui produit seulement une valeur de classe. Chaque classificateur discret produit une paire de composantes (FAR, HR) correspondant à un seul point dans l'espace de ROC. Un exemple des classificateurs discrets est représenté en Figure 18:

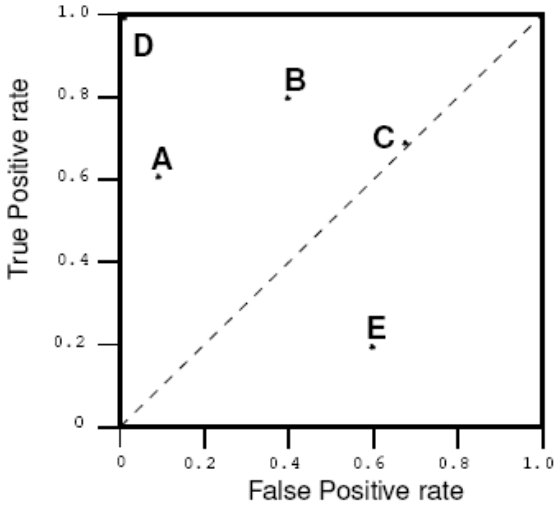


Illustration 18: Un exemple de 5 classificateurs discrets sur un graphe ROC [Fawcett, 2004].

Il est important de noter plusieurs points concernant les graphes de ROC. Le point situé au coin inférieur gauche (0;0) représente la stratégie de ne jamais réussir une classification positive ; un tel classificateur ne commet aucune erreur du type fausse positive mais les gains en résultats vrai positive sont aussi nulles. La stratégie opposée, qui consiste à obtenir sans réserve des classifications positives, est représentée par le point supérieur droit (1;1). Le point (0;1) représente la classification parfaite (point D, sur le graphe de la Figure 18).

Généralement, un point dans l'espace de ROC est considéré comme un meilleur résultat s'il se trouve au coin nord-ouest (le taux de HR est plus haut, le FAR est inférieur, ou tous deux). Des classificateurs qui apparaissent sur le côté gauche d'un graphique de ROC, près de l'axe des abscisses, peuvent être considérés comme «conservateurs»: ils font des classifications positives seulement à forte évidence ainsi ils font peu de fausses positives, mais ils ont aussi souvent des valeurs faibles de vrais positifs. En revanche, les classificateurs qui se trouvent placés sur le côté supérieur droit d'un graphique de ROC peuvent être considérés comme «libéraux» : ils font des classifications positives à évidence faible, en conséquence ils classifient presque tous les positifs correctement, mais ils ont souvent un taux élevés de faux positifs. Par exemple, en regardant la Figure 18, le point A est plus conservateur que le B. En résumé, les résultats qui se placent dans la région supérieure gauche d'un graphe ROC sont plus intéressants.

Pour essayer de comprendre le score du modèle par rapport à une classification complètement aléatoire, les résultats obtenus pour le taux de succès et le taux de fausse

alarme ont été représenté dans une courbe ROC (Figure 18). Pour tous les types de stations, et pour les deux jours de prévision, le système de modèles donne des résultats éloignés de la classification aléatoire : ils se placent dans la courbe ROC loin de la ligne droite HR=FAR. C'est pour les stations du type rural et urbain qu'on peut trouver une consistance de la classification HR/FAR sur le graphe ROC entre les deux jours de prévision D+1 et D+2. La station rurale présente un problème le 29 et le 31 juillet : les concentrations supérieures à 180 $g\ m^{-3}$ sont systématiquement surestimés. Les stations urbaines surestiment les concentrations le 28 et le 29 juillet. Les Figures 12 et 13 montrent que le système numérique de prévision maintient une inertie sur les concentrations d'ozone élevées les 27 et 28 juillet, ce qui explique les résultats de la courbe ROC et de la précision des simulations pendant ces jours de prévisions.

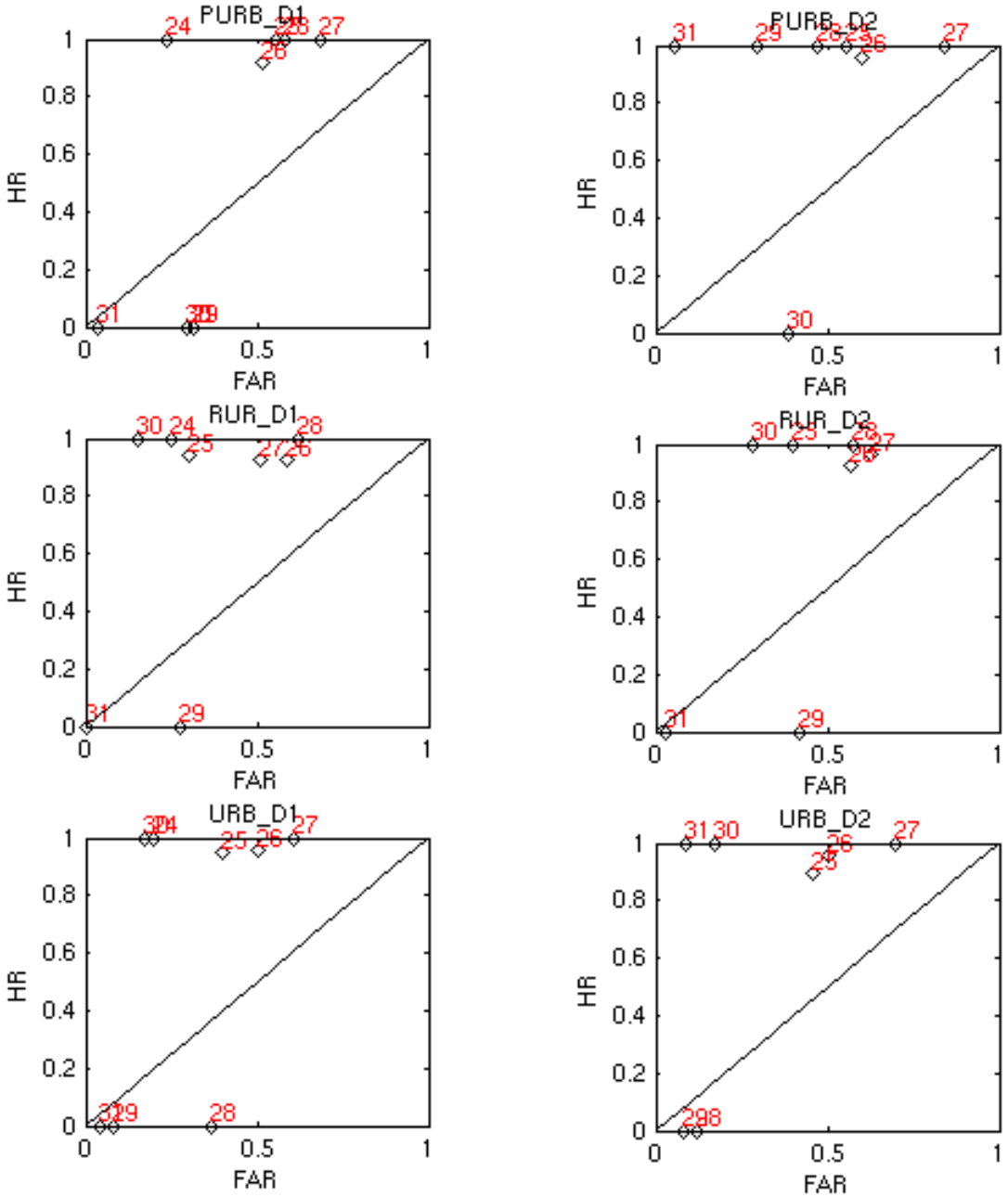
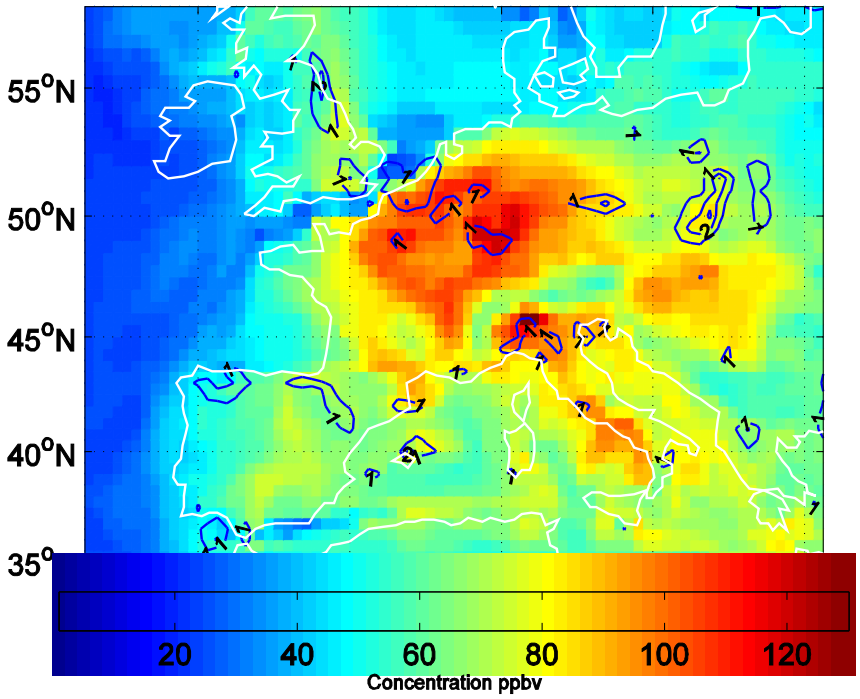
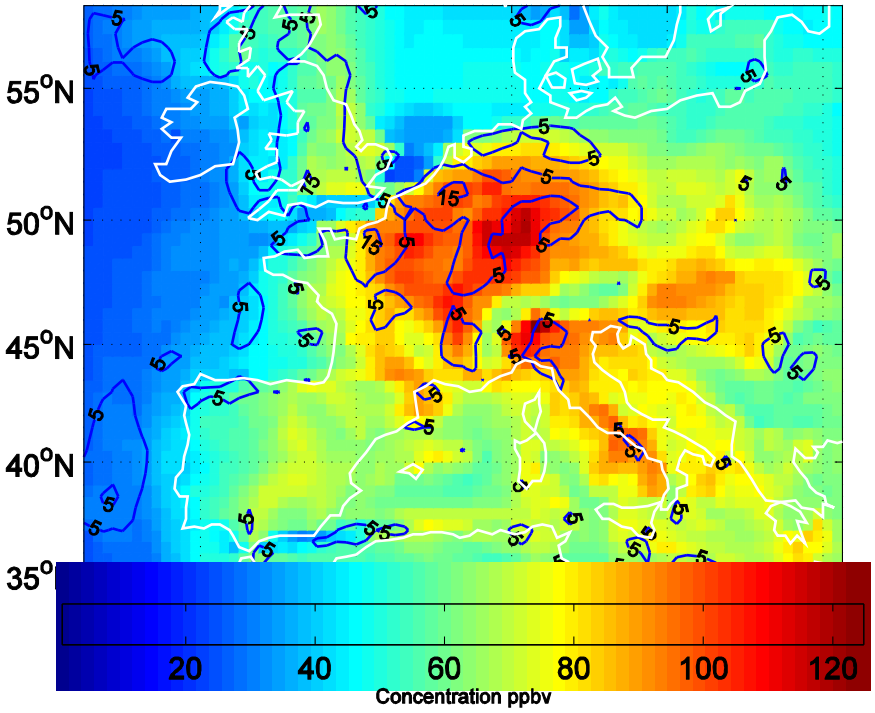


Illustration 19: Courbes ROC pour le jour D1 (à gauche) et D2 (à droite) de prévision avec la chaine ARPEGE-MM5-CHIMERE.

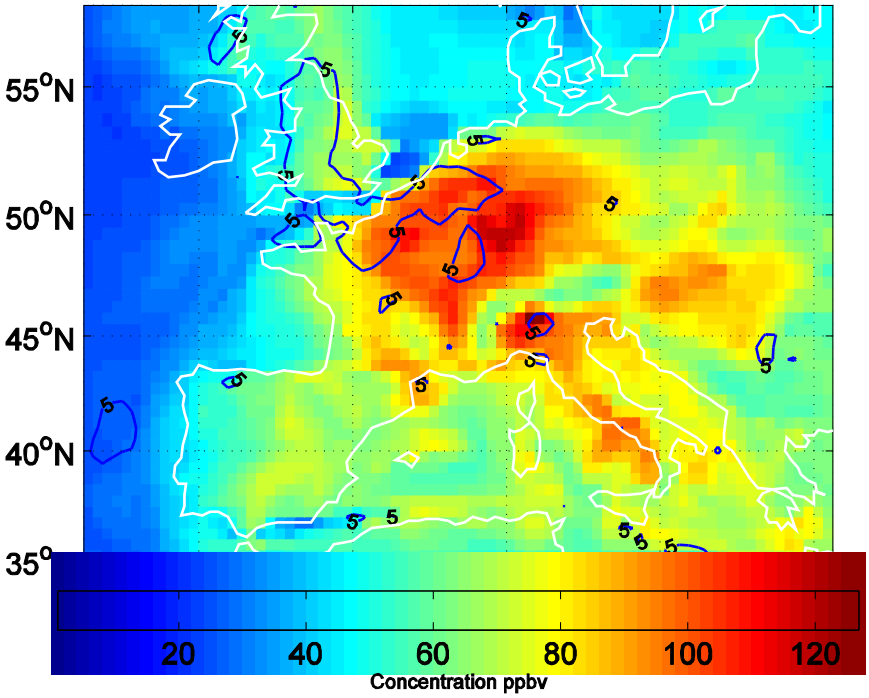
Comme expliqué plus haut, le 26 juillet a été caractérisé par un nombre élevé dé vènements d'in formation au public sur l'O uest et le centre de l'Europe. La Figure 19 montre les cartes d'ozone en surface obtenues pour le 26 juillet, jour D+1 de prévision à 15 heures UTC, et la variabilité apportée pour les membres les incertitudes introduites dans les membres météorologiques, les membres émissions-chimie, et tout l'ensemble.



a) ensemble dĕ missions-chimie



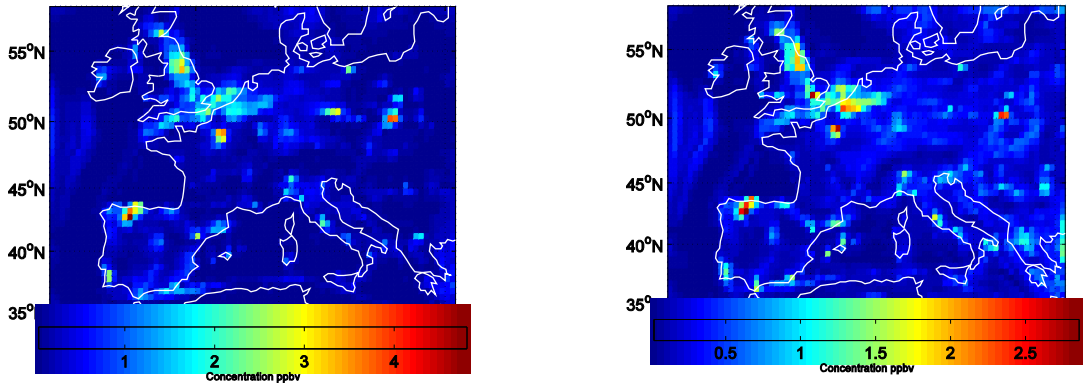
b) ensemble météorologiques



c) Ensembles

Illustration 20: Moyenne et écart-type de la concentration d'ozone (ppbv) prévue pourD+1, sur l'Europe le 26 juillet a 15H00 UTC.

La Figure 20 permet d'extraire l'importance relative des membres de l'ensemble dans la simulation. Les membres d'ensemble ont été divisé en deux groupes, d'un côté ce qui amène de la variabilité sur les concentrations d'ozone par la variabilité des champs météorologiques (Figure 20 a), de l'autre côté la variabilité obtenue par les considérations reliées aux émissions et autres paramètres dont la chimie du modèle dépend (Figure 20 b). L'écart-type obtenu avec les ensembles météorologiques est plus élevée et aussi plus répandu sur le domaine de simulation que l'écart type calculé pour les membres d'ensembles émissions-chimie : 15 ppbv *vs* 5 ppbv, respectivement comme valeurs maximales pour ce paramètre statistique. La plus forte variabilité se trouve sur les aires de grande production photochimique ainsi que sur l'Angleterre. A cette heure, la dispersion de résultats de l'ensemble due aux émissions est plutôt faible, entre 1 et 3 ppbv. Les variations plus marquées se situent sur l'Europe de l'Est et l'Angleterre. Ce sont les changements sur les émissions-chimie qui affaiblissent les valeurs maximales sur le domaine à cette heure de simulation (Figure 20), ce qui justifie l'introduction de variations sur les processus d'émissions et de chimie.



a) b)

Illustration 21: Écart type de la concentration d'ozone en surface calculée avec les membres d'émission-chimie pour le D+1 de prévision le 26 juillet.

La variabilité des concentrations d'ozone en surface simulées introduite par les variations sur les valeurs d'émissions et de chimie sont plus importantes à 7H00 UTC ; ils peuvent atteindre les 4 ppbv. A 9H00 UTC la variabilité diminue presque de moitié sur tout le domaine. Les régions plus affectées pour cette variabilité sont l'Angleterre, la Manche, la Belgique, le Pays Bas, la région Parisienne, le Nord-ouest de l'Espagne, et le détroit de Gibraltar.

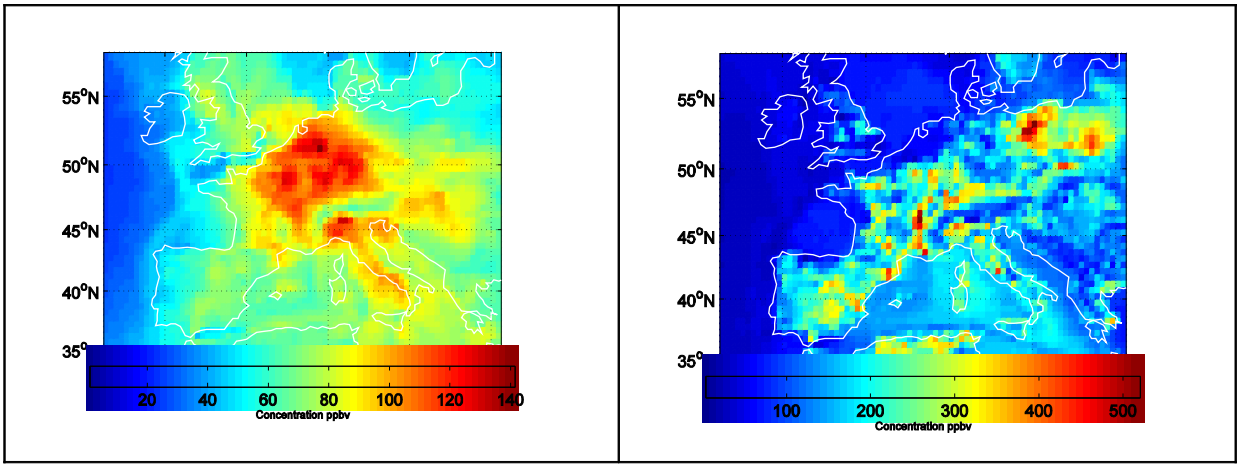


Illustration 22: Concentration maximale d'ozone prévu pour le 26 juillet, D+1 de prévision, comparaison chaine ARPEGE-MM5-CHIMERE et ARPEGE-CHIMERE.

Par comparaison, la chaine ARPEGE-CHIMERE a montré des résultats de concentrations d'ozone très élevés sur le domaine de simulation, presque quatre fois supérieurs à ceux de la chaine ARPEGE-MM5-CHIMERE (Figure 22). L'interpolation du vent pour les deux premiers niveaux de pression donne des valeurs très faibles de vents au niveau près de la surface. A l'échelle synoptique le gradient de pression justifie les valeurs trouvées pour le vent, pour un modèle global. Les niveaux de concentration d'ozone obtenus par la chaine ARPEGE-CHIMERE étant clairement irréalistes, l'évaluation de cette chaine n'a pas été poursuivie dans cette étude. *Cet aspect nécessitera un travail complémentaire qui n'a pas pu être effectué dans le cadre de cette année de post-doctorat.*

6. Conclusion

Cette étude visait à **étudier la faisabilité et le gain que l'on peut obtenir en utilisant des techniques d'ensemble pour la prévision de la qualité de l'air**. L'approche est originale car a été développée dans un cadre de météorologie mais relativement peu testée pour la pollution atmosphérique. Entre ces deux domaines d'étude, la méthodologie ne peut être directement transférée: alors que les processus dynamiques sont fortement non-linéaires et contraints par les conditions initiales du système, les processus de chimie-transport sont plus faiblement non-linéaire et fortement sensibles aux conditions aux limites du système (météorologie, émissions, dépôt).

La prévision d'ensemble nécessite de réaliser de nombreuses fois la simulation d'une période donnée mais en utilisant des perturbations du système pour chacune. On obtient ainsi un « ensemble » de résultats que l'on peut recombiner statistiquement: on obtient alors une information supplémentaire sur l'erreur de prévision et l'on peut donc réduire son incertitude.

Cependant dans un système prévu pour réaliser des prévisions quotidiennes, le temps de calcul reste une contrainte forte. Si les modèles météorologiques réalisent de 10 à 50 simulations sur des super-calculateurs, il est irréaliste d'imaginer coupler à toutes ces simulations des pertubations supplémentaires sur les modèles de chimie-transport.

Le but de cette étude était donc de **chercher l'optimum des perturbations à apporter à un ensemble de 5 à 10 membres** et ayant la même représentativité statistique sur les scores de prévision qu'un système complet (une centaine de membres). Pour cela deux chaines de calculs différentes ont été mises en place. Afin de préserver la compréhension des résultats (en accord avec la chaine existante à PREVAIR), et ayant des difficultés informatiques avec une des deux chaines, le travail s'est concentré sur une chaine de modélisation ARPEGE-MM5-CHIMERE.

Pour une simulation représentative de forts épisodes de pollution en Europe, du 24 juillet au 4 aout 2006, les calculs de scores ont permis d'évaluer la probabilité d'occurence de dépassements de seuils d'alerte. En comparant directement des ensembles issus de perturbations météorologique uniquement et des ensembles perturbant surtout les autres paramètres directement photochimiques (émissions surfaciques, taux de photolyse, vitesse de dépôt), **il a été montré que le plus fort poids des perturbations d'ensemble était lié globalement à la météorologie.**

Plus quantitativement et pour cette période riche en dépassement de seuils d'alerte en France et en Allemagne, nous avons montré que la dégradation que l'on peut atteindre d'une échéance de prévision entre [D+1] et [D+2] est faible: cela signifie que la prévision est assez stable dans le temps et donc que la météorologie prévue change moins d'un jour à l'autre que les perturbations créées (mais qui sont cependant différentes par nature: une prévision fausse et constante n'en est pas moins variable). Les scores de prévision ont été estimés heure par heure et ont pu montré de bonnes corrélations (de 0,6 à 0,9) sur l'ozone (sachant que les scores « habituellement » réalisés sont faits uniquement sur les pics: nos résultats incluent ici aussi les processus nocturnes, les plus difficiles à simuler).

Spatialement, la prévision est la meilleure pour les stations péri-urbaines. Temporellement, les différents membres de la prévision montrent des influences fortes à des heures différentes: ainsi le poids relatif des perturbations sur les émissions devient majoritaire le matin, aux heures de fortes émissions de trafic, alors que la météorologie reste d'influence majoritaire en période convective ou le mélange vertical (et donc le vent et la température) est prépondérant.

La période d'étude choisie a été limitée en temps pour des considérations de cout informatique. Cette étude étant avant tout dans un but de perspective méthodologique, nous

nous sommes concentrés sur un cas d'épisodes de pollution avérés pour lequel la prévision devait être améliorée. On pourra cependant étendre temporellement cette méthodologie afin de juger de l'impact de situation différentes sur l'approche choisie.

Remerciements

Remerciements à Jean Louis Monge pour l'aide appportée sur la construction de l'interface ARPEGE-CHIMERE. Remerciements à Vincent et Kinou Noel pour la révision du Français.

Références

Atger F., 1999: The skill of ensemble prediction systems. Mon. Wea. Rev, 127, 1941-1953.

Bessagnet B., Hodzic A., Vautard R., Beekmann M., Cheinet S., Honoré C., Liousse C., Rouil L., 2004, Aerosol modeling with CHIMERE - Preliminary evaluation at the continental scale. Atmos. Environ., 38, 2803-2817.

Blond, N., and R. Vautard 2004, Three-dimensional ozone analyses and their use for short-term ozone forecasts, J. Geophys. Res., doi:10.1029/2004JD004515.

Bowler, N.; Dando, M.; Beare, S. and Mylne, K. (2007), The MOGREPS short-range ensemble prediction system: Verification report - Trial Performance of MOGREPS January 2006 - March 2007. Forecasting Research Technical Report No 503. (http://www.metoffice.gov.uk/research/nwp/publications/papers/technical_reports/index.html)

Carvalho, A.C.; Menut, L., Vautard, R. et Nicolau, J. (2007), Rapport d'étape pour l'étude: Evaluation de l'incertitude de la prévision de la qualité de l'air par méthodes d'ensembles utilisant les modèles ARPEGE et CHIMERE. Contract 05 62 c 0094 ADEME. mars 2007.

Chiriaco, M., Vautard, R., Chepfer, H., Haeffelin, M., Wanherdrick, Y., Morille, Y., Protat, A., and J. Dudhia 2005, The Ability of MM5 to simulate Ice clouds: Systematic Comparison between Simulated and Measured Fluxes and Lidar/Radar profiles at SIRTA atmospheric observatory. Monthly Weather Review, 134, 897-918.

Dabberdt, W. F and E. Miller, 2000, Uncertainty, ensembles and air quality dispersion modeling: applications and challenges, Atmos. Environ., 34, pp. 4667-4673.

Delle Monache, L., T. Nipen, X. Deng, Y. Zhou, and R. Stull, 2006b, Ozone ensemble forecasts: 2. A Kalman filter predictor bias correction, J. Geophys. Res., 111, D05308, doi:10.1029/2005JD006311.

Delle Monache, L., X. Deng, Y. Zhou, and R. Stull, 2006a, Ozone ensemble forecasts: 1. A new ensemble design, J. Geophys. Res., 111, D05307, doi:10.1029/2005JD006310.

Delle Monache, L.; Deng, X.; Zhou, Y.; Modzelewski, H.; Hicks, G.; Cannon, T.; Stull, R. B. and Cenzo, C., 2004, Air Quality Ensemble Forecast Over the Lower Fraser Valley, British Columbia, 27thNATO/CCMS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application, 25 -29 October 2004, BanffCentre, Canada.

Delmas, R.; Mégie, G. et Peuch, V-H. (2005), Physique et chimie de l'atmosphère. Collection Echelles, Ed. Belin, 2005. ISBN: 2-7011-3700-4.

Dudhia, J., 1993, A nonhydrostatic version of the Penn StateNCAR mesoscale model: Validation tests and simulation of an Atlantic cyclone and cold front. Monthly Weather Review, 121, 14931 513.

ECMWF Newsletter No. 104 - Summer 2005 (http://www.ecmwf.int/publications/newsletters/meteorology_articles.html#ep).

EEA (2007) Air pollution by ozone in Europe in summer 2006. Technical report No 5/2007 (http://reports.eea.europa.eu/technical_report_2007_5/en)

Galmarini, S., R. Bianconi, W. Klug, T. Mikkelsen, R. Addis, S. Andronopoulos, P. Astrup, A. Baklanov, J. Bartniki, J.C. Bartzis, R. Bellasio, F. Bompay, R. Buckley, M. Bouzom, H. Champion, R. D'Amours, E. Davakis, H. Eleveld, G.T. Geertsema, H. Glaab, M. Kollax, M. Ilvonen, A. Manning, U. Pechinger, C. Persson, E. Polreich, S. Potemski, M. Prodanova, J. Saltbones, H. Slaper, M.A. Sofiev, D. Syrakov, J.H. Sørensen, L. Van der Auwera, I. Valkama, R. Zelazny, 2004, Ensemble dispersion forecasting—Part I: concept, approach and indicators, Atmos. Environ., 38, 4607–4617.

Ginoux, P., M. Chin, I. Tegen, J. Prospero, B. Holben, O. Dubovik, and S.-J. Lin, Sources and global distributions of dust aerosols simulated with the GOCART model, J. Geophys. Res., 106, 20,255-20,273, 2001.

Hamill, T. M., S. L. Mullen, C. Snyder, Z. Toth and D. P. Baumhefner (2000). Ensemble Forecasting in the Short to Medium Range: Report from a Workshop, Bull. Am. Meteorol. Soc., 81, 2653-2664.

Hanna, S. R., Z. Lu, H. C. Frey, N. Wheeler, J. Vukovich, S. Arunachalam, M. Fernau and D. A. Hansen (2001), Uncertainties in predicted ozone concentrations due to input uncertainties for the UAM-V photochemical grid model applied to the July 1995 OTAG domain. Atmos. Environ., 35, 891-903.

Hauglustaine, D. A., F. Hourdin, S. Walters, L. Jourdain, M.-A. Filiberti, J.-F. Larmarque, et E. A. Holland (2004), Interactive chemistry in the Laboratoire de Météorologie Dynamique general circulation model: description and background tropospheric chemistry evaluation, J. Geophys. Res., 109, D04314, doi:10.1029/3JD003957, 2004.

Honoré, C.; Rouil, L.; t Vautard, R.; Beekmann, M.; Bessagnet, B.; Malherbe, L.; Meleux, F.; Dufour, A.; Elichegaray, C.; Flaud, J-M.; Menut, L.; Martin, D.; Peuch, V H.; Poisson, N., Predictability of regional air quality in Europe: the assessment of three years of operational forecasts and analyses over France, Journal of Geophysical Reseach, under revision.

IPCC (2006). IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories (http://www.ipcc nggip.iges.or.jp/public/2006gl/pdf/3_Volume3/V3_5_Ch5_Non_Energy_Products.pdf).

IPSL-INERIS-LISA (2005), Documentation of the chemistry-transport model CHIMERE, disponible en http://euler.lmd.polytechnique.fr/chimere/

Kimoto, M.; Mukougawa, H. and Yoden, S. (1992), Medium-Range Forecast Skill Variation and Blocking Transition. A Case Study. Monthly Weather Review, Vol. 120, pp. 1616-1627.

Kühlwein, J., and R. Friedrich (2000). Uncertainties of Modelling Emissions from Road Transport. Atmos. Environ. 34, pp. 4603-4610.

Lawrence, Mark G., (2005), The Relationship between Relative Humidity and the Dewpoint Temperature in Moist Air: A Simple Conversion and Applications. Bulletin of the American Meteorological Society, Vol, 86,, pp. 225–233.

Lemus, L.; Rikus, Lawrie; Martin, C. and Platt, R. (1997), Global Cloud Liquid Water Path Simulations, Journal of Climate, Vol, 10, pp. 526–4.

Lorenz, E. N., 1963, Deterministic non-periodic flow. J. Atmos. Sci., 20, pp. 130-141.

Mason, S. J., and N. E. Graham, 1999: Conditional probabilities, relative operating characteristics, and relative operating levels. Weather and Forecasting, 14, 713-725.

Menut, L., 2003, Adjoint modeling for atmospheric pollution process sensitivity at regional scale, J. Geophys. Res., 108(D17), 8562, doi:10.1029/2002JD002549, 2003.

Menut, L., R. Vautard, M. Beekmann, C. Honoré, 2000, Sensitivity of photochemical pollution using the adjoint of a simplified chemistry-transport model, J. Geophys. Res., 105(D12), 15379-15402, 10.1029/1999JD900953, 2000.

Meteo-France 2006a), Meteo.Hebdo. Bulletin hebdomadaire dĕt udes et de renseignements, n° 29,Semaine du 17 juillet 2006 au 23 juillet 2006.

Meteo-France 2006b), Meteo.Hebdo. Bulletin hebdomadaire dĕt udes et de renseignements, n° 30,Semaine du 24 juillet 2006 au 30 juillet 2006.

Meteo-France 2006c), Meteo.Hebdo. Bulletin hebdomadaire dĕtud es et de renseignements, n° 22,Semaine du 29 mai 2006 au 4 juin 2006.

Meteo-France 2006d), Meteo.Hebdo. Bulletin hebdomadaire dĕt udes et de renseignements, n° 30,Semaine du 5 juin 2006 au 11 juin 2006.

Pagowski, M., G. A. Grell, D. Devenyi, S. E. Peckham, S. A. McKeen, W. Gong, L. Delle Monache, J. N. McHenry, J. McQueen and P. Lee, 2006, Application of dynamic linear regression to improve the skill of ensemble-based deterministic ozone forecasts, Atmos. Environ., 40, 3240-3250.

Passant, N. R., 2002, Speciation of UK emissions of NMVOC, AEAT/ENV/0545 report, London.

Richardson, D. S. (2001), Measures of skill and value of ensemble prediction systems, their interrelationship and the effect of ensemble size. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, vol. 127, Issue 577, p.2473-2489.

Stull, Roland B. (2000), Meteorology for Scientists and Engineers. 2nd edition BROOKS/COLE. ISBN: 0-534-37214-7

T. Fawcett, (2004), ROC Graphs: Notes and Practical Considerations for Researchers, Machine Learning, 2004.

Talagrand, O., Vautard, R. & Strauss, B., (1999), Evaluation of probabilistic prediction systems. Proceedings of the ECMWF Workshop on Predicability, 20-22 October 1997, ECMWF, Shienfild Park, Reading RG2-9AX, 1-26.

Theloke, J. and Friedrich, R., 2002, NMVOC Emissions from Solvent Use in Germany 2000. Annual Report 2001 of the EUROTRAC subproject Generation and evaluation of emission data – GENEMIS. Munich 2002.

Toth, Z.; Zhu, Y. and Marchok, T. (2001), The Use of Ensembles to Identify Forecasts with Small and Large Uncertainty, Weather and Forecasting, Vol. 16, pp. 4634 77.

Vautard R., M. Beekmann, J. Roux, D. Gombert, 2001, Validation of a deterministic forecasting system for the ozone concentrations over the Paris area. Atmos. Environ., 35, pp. 2449-2461.

Vautard, R et al (2006). Is regional air quality model diversity representative of uncertainty for ozone simulation? Geophys. Res. Lett., 33, L24818, doi: 10.1029/2006GL027610.

Venkatram, A., 1979, A note on the measurement and modeling of pollutant concentrations associated with point sources. Boundary-Layer Meteorology, 17, pp.523-536.

Wilks D. S. (1995) Forecast verification. Statistical Methods in the Atmospheric Sciences, Academic Press.