



Modélisation de la qualité de l'air (Action B2.2)

Production d'un indice de volatilisation, étude de performance des modélisations de l'ammoniac et assimilation de données

Version du 7 janvier 2026

*Lifeabaa2021@airbreizh.asso.fr
<https://lifeabaa2021.eu>*



English summary of action B.2.2 : “Air quality modeling : Production of volatilization index, performance study of ammonia models and data assimilation”

The goal of action B2.2 is to gather NH_3 data from air quality models, to analyze their performance against on-site measurements (action B1.2) and to produce an assimilated model that could be integrated into Air Breizh's prevision activity.

Numerical tools

To achieve the action's goals, numerical tools were either deployed or developed to handle the huge amount of air quality data, both modeled and measured, required.

A python package called Demetrios, used to collect and store these models in an organized way, was developed during the first months of the project.

Through a collaboration established within the scope of the project, a tool called Airpy developed by Airparif has been installed. This tool is used to tap in the data stored by Demetrios and produce maps, graphs and to help us use and analyze the data that we collect.

Finally, an assessment tool called ScoresModel was developed to perform the model/measurement analysis

Theoretical basis

Part of action B2.2 was to develop a volatilization index to feed into the web application created in action B2.3. A bibliographic search was conducted to understand the mechanisms involved in ammonia volatilization in the field. That search was used to determine which of those parameters the volatilization index.

The chosen parameters are :

- Atmospheric stability, through the Monin-Obhukov length.
- Wind speed.
- Precipitation and specifically rain

These parameters and especially the Monin-Obhukov length are explained in detail in the full report and were also the subject of a bibliographic search.

Volatilization index

The volatilization index goal is to characterize the atmospheric part of NH_3 volatilization in the field. This index is calculated every day for every cell of the model (represented in the figure below). Then, for each municipality, the index is determined as the most frequently occurring index of the day.

The volatilization index uses the Atmospheric stability the Monin-Obhukov length, wind speed and precipitation (specifically rain) to give an idea of how favorable the atmosphere is to the volatilization process. Several tests were conducted to determine the adequate thresholds to use for windspeed and precipitations.

The volatilization index is then sent every day to the web application through an API. The production of the index is monitored, so the application can function properly.

Model-Measurement analysis

A model-measurement analysis was conducted to study the performance of a selection of models against on-site measurements for the year 2022 and 2023. The modeled data was collected and exploited using the numerical tools developed for the project. The data was taken from these models, used in Air Breizh's prevision activity :

- The 'EsmeraldaHR' (high resolution, 3km) and 'Esmeralda BR' (low resolution, 15km) models, produced by ESMERALDA.
- The 'Ensemble' model, produced by COPERNICUS.
- The 'Chimere' model, produced by the INERIS (Institut National de l'Environnement industriel et des risques)
- The 'Mocage' model, produced by Météo-France.
- The 'Prevair' model, produced by the INERIS.

The measurements sites used in the study are maintained by the local AASQA and the data was either sent by the organism themselves or collected using the national database Geodair.

The performance of the models was assessed by looking at statistical values. The analysis was done on the whole one-year period and specified for each type of station and each region in the datasets to understand the strengths and weaknesses of the models.

The 2023 analysis was focused on Brittany and on the Spring/Summer period. The performances were fairly poor with the European models "Ensemble", Mocage and Chimere giving the best results overall.

Data assimilation and statistical forecasting

Assimilation with ModelBLUE

In order to improve the accuracy of ammonia modeling, a geostatistical method called ModelBLUE, developed by Airparif, was used. The method was deployed and tested on Brittany using measurement sites present on the territory. These sites are both from the ABAA project and already part of AirBreizh's surveillance network.

The results of the assimilated model were analysed using the same statistical indicators as previously. Using this method, the results were significantly improved, reducing RMSE by half, increasing the correlation above 0.7 and improving mean bias.

Although the results are promising, there are still limitations to consider. The number of measurement sites is limited, and access to more data from other regions is currently difficult in a production environment. Also, due to the relatively poor availability of ammonia data, the hyperparameters used for the ModelBLUE method, were borrowed from studies on other pollutants.

Statistical Forecasting

A statistical forecasting method was used, in conjunction with ModelBLUE, to produce a corrected forecasting model. The method uses every available model that provides ammonia data as well as measurements. The modeling data is analysed on a 7 day period to produce a pseudo-measurement for the next two days and then assimilated onto an already existing forecasting model to correct it.

This new statistical forecasting model will be used in action B 4.3 and integrated within AirBreizh's forecasting tools.

Contexte du rapport

Ce rapport a été produit dans le cadre du projet ABAA Life 2021 qui vise à réduire les émissions d'ammoniac d'origine agricole dans l'air ambiant et améliorer la qualité de l'air. Ce projet innovant, sur 4 ans, est porté par l'association agréée de surveillance de la qualité de l'air, Air Breizh, en partenariat avec la Chambre d'Agriculture de région Bretagne (CAB).



Conditions de diffusion

Air Breizh est l'organisme agréé de surveillance de la qualité de l'air pour la région Bretagne, au titre de l'article L221-3 du Code de l'environnement, précisé par l'arrêté du 16 avril 2021 pris par le Ministère de l'Environnement portant renouvellement de l'agrément de l'association. À ce titre et compte tenu de ses statuts, Air Breizh est garant de la transparence de l'information sur les résultats des mesures et les rapports d'études produits selon les règles suivantes :

L'équipe du projet ABAA, constitué de salariés d'Air Breizh et de la CAB, réserve un droit d'accès au public à l'ensemble des résultats de mesures et rapports d'études selon plusieurs modalités : document papier, mise en ligne sur le site internet du projet ABAA (<https://lifeabaa2021.eu>), et sur le site internet d'Air Breizh (www.airbreizh.asso.fr).

Toute utilisation de ce rapport et/ou des données associées doit faire référence au projet ABAA.

Air Breizh et la CAB ne peuvent, en aucune façon, être tenus responsables des interprétations et travaux utilisant les rapports d'études pour lesquels l'équipe du projet n'aura pas donné d'accord préalable.

Cofinancé par l'Union européenne. Les opinions exprimées n'engagent que leur auteur(s) et ne reflètent pas nécessairement celles de l'Union européenne ou du CINEA. Ni l'Union européenne ni l'autorité subventionnaire ne peuvent en être tenues responsables.

Organisation interne - contrôle qualité

Rédaction	Relecture	Validation	Version/Date
Nicolas Moreau (Chef de projet Prévision et Alerte)	Simon Leray (Responsable Service Numérique et Communication)	Gaël Lefeuvre (Directeur)	Version du 7 janvier 2026

Table des matières

Contexte du rapport	3
Glossaire	6
1 Introduction	7
1 Le projet "Ammonia Brittany Air Ambiant"	7
2 L'action modélisation (B2.2)	7
3 La volatilisation de l'ammoniac	9
4 Evaluation des modélisations de l'ammoniac	9
5 Assimilation de données et prévision statistique	9
2 Prérequis techniques	10
1 Les outils numériques	10
1.1 Acquisition des données : Demetrios	10
1.2 Exploitation des données : Airpy	11
1.3 Analyse des performances de modélisation : ScoresModel	11
2 Utilisation des données	11
3 La volatilisation de l'ammoniac	12
4 Etude de la stabilité atmosphérique	14
1 Présentation de la couche limite (Lambert, 2012 [8])	14
1.1 La Couche Limite Atmosphérique (CLA)	14
1.2 Bilan radiatif de la surface terrestre et de l'atmosphère	14
1.3 Stratification thermique et stabilité de la CLA	15
1.4 La Couche Limite Atmosphérique de Surface (CLS)	16
1.5 Evolution typique de la stabilité au cours d'une journée	16
2 Théorie de similitude de Monin-Obuhkov (Wilson, 2013 [20])	18
2.1 La théorie de la similitude	18
2.2 La théorie de Monin-Obuhkov dans la CLS	18
5 Analyse des données fournies par ESMEALDA	20
1 Données météo MMOUT	20
2 Exploitation des données par ESMEALDA	20
3 L'application du calcul de la LMO par ESMEALDA	21
3.1 Calcul des variables intermédiaires	21
3.2 Calcul du flux de chaleur Sol / Atmosphère <i>potf</i>	25
3.3 Calcul de la température potentielle virtuelle à l'altitude <i>ztherm potts</i>	26
3.4 Calcul de la LMO et du paramètre de stabilité	26
4 Comparaison des résultats	27
6 Elaboration de l'indice de volatilisation	31
1 Calcul de l'indice de volatilisation	31
1.1 Choix des paramètres pris en compte	31
1.2 Méthode de calcul de l'indice	33
1.3 Fourniture de l'indice de volatilisation	33
2 Tests de sensibilité de l'indice de volatilisation	34

2.1	Résultats des tests de sensibilité pour le seuil de pluie S_p	34
2.2	Résultats des tests de sensibilité pour le seuil de vent S_v	37
2.3	Conclusion des tests et choix des seuils S_p et S_v	39
3	Conclusion : Intégration de l'indice de volatilisation dans AgriVision'Air	40
7	Evaluation des modélisations de l'ammoniac pour l'année de référence 2022	41
1	Les indicateurs statistiques	41
2	Les données de modélisation	42
3	Les données de mesures	42
3.1	Présentation du jeu de données	42
3.2	Détermination d'un seuil d'alerte NH_3 pour l'évaluation des modélisations	46
4	Présentation des résultats	47
4.1	Scores simples	47
4.2	Scores par région	50
4.3	Présentation des scores par saison	52
8	Evaluation des modélisations de l'ammoniac pour la Bretagne sur la période printemps/été 2023	55
1	Les données de mesure	55
2	Présentation des résultats	57
2.1	Scores simples	57
2.2	Scores par gamme de concentration et détection de dépassement	58
2.3	Scores par typologie	60
2.4	Scores par échéance	60
9	Conclusion de l'évaluation des modélisations de l'ammoniac	61
1	Analyse par composante pour le redéploiement des stations de mesures.	62
1.1	Objectif	62
1.2	Analyse de EsmeraldaHR	63
1.3	Analyse du modèle Ensemble	64
10	Assimilation de données et prévision statistique	65
1	Assimilation de données	65
1.1	Méthode Blue	65
1.2	Présentation du jeu de données de mesure	66
1.3	Cartes de modélisations assimilées	68
1.4	Présentation des scores	70
2	Prévision statistique	72
2.1	Méthode	72
3	Conclusion assimilation et prévision statistique	73
11	Conclusion	74
	Liste des Figures	75
	Liste des Tables	77
	Références	78
	Financeurs du projet	79

Glossaire

Abréviations

ABAA	Ammonia Brittany Air Ambient
LCSQA	Laboratoire Central de Surveillance de la Qualité de l'Air
AASQA	Association Agréée de Surveillance de la Qualité de l'Air
ESMERALDA	EtudeS MultiRegionALes de l'Atmosphère
CAB	Chambre d'Agriculture de région Bretagne
NCAR	National Center for Atmospheric Research
NCEP	National Center for Environmental Prediction
GFS	Global Forecast System
IPSL	Institut Pierre-Simon Laplace
CLA	Couche Limite Atmosphérique
LMO	Longueur de Monin-Obukhov
CLS	Couche Limite de Surface
RMSE	Root Mean Square Error

Polluants

PM10	Particules fines de diamètre inférieur à 10 μm
PM2.5	Particules fines de diamètre inférieur à 2.5 μm
O₃	Ozone
NO₂	Dioxyde d'azote
NH₃	Ammoniac

Unités de mesure

$\mu\text{g}/\text{m}^3$	Microgramme (10^{-6}g) par mètre cube (d'air)
--	--

1 Introduction

1 Le projet "Ammonia Brittany Air Ambient"

Porté par Air Breizh, l'Association Agréée de Surveillance de la Qualité de l'Air (AASQA) en Bretagne, et en partenariat avec la Chambre Régionale d'agriculture de Bretagne, le projet Ammonia Brittany Air Ambient 2021 (ABAA) vise à réduire les niveaux de particules dans l'air ambiant, à travers une diminution des émissions d'ammoniac d'origine agricole (AirBreizh and CRAB, 2021 [2]).

Pour cela, un réseau d'agriculteurs volontaires sera constitué dans un premier temps sur un territoire pilote. L'objectif sera de les aider et de les accompagner suffisamment pour permettre leur appropriation et leur adhésion à la pratique de techniques agricoles moins émettrices en ammoniac.

Un outil d'aide à la décision lié aux émissions d'ammoniac, nommé "AgriVision'Air", sera développé dans le cadre du projet. Il permettra de répondre aux objectifs principaux suivants :

- Proposer un outil simple de simulation de l'impact d'une pratique d'épandage en prenant en compte les prévisions journalières sur l'importance du phénomène de volatilisation.
- Enrichir l'inventaire des émissions à partir des pratiques d'épandage réalisées.
- Informer les utilisateurs de la qualité de l'air de leur territoire et diffuser au plus grand nombre les alertes de pics de pollution aux particules fines de leur département.

Afin de pouvoir répondre à ces objectifs, des modélisations prévisionnelles du pouvoir volatilissant de l'ammoniac et de la dispersion atmosphérique des polluants dans l'air devront être réalisées et transmises à ce nouvel outil AgriVision'Air.

2 L'action modélisation (B2.2)

Air Breizh dispose d'un plate-forme de modélisation inter-régionale ESMERALDA (EtudeS Multi RégionALES De l'Atmosphère). Elle résulte de l'étroite collaboration de 6 AASQAs : Airparif, Air Breizh, Air Pays de la Loire, Atmo Hauts de France, Atmo Normandie et Lig'Air (Centre-Val-de-Loire).

La plate-forme ESMERALDA s'appuie sur deux modèles :

- Un modèle météorologique prévisionnel MM5, distribué par le National Center for Atmospheric Research (NCAR) de l'université de Pennsylvanie. C'est un modèle non hydrostatique à aire limitée capable de prévoir les phénomènes météorologiques à méso-échelle L ($10 < L < 1\,000$ km). Il est alimenté par les prévisions du modèle Global Forecasting System (GFS) du National Centers for Environmental Prediction (NCEP). Ce modèle a été développé en langage Fortran et est open-source. (NCAR [12])
- Un modèle de chimie-transport prévisionnel CHIMERE, développé par l'Institut Pierre-Simon Laplace (IPSL) et l'Institut National de l'Environnement et des RISques (INERIS). Il prend en compte les processus d'émissions (inventaire des émissions atmosphériques) et de transport (modèle météorologique), les transformations chimiques ainsi que le dépôt des espèces gazeuses et des aérosols, afin de simuler les évolutions spatiales et temporelles des champs de concentrations des polluants. Le modèle CHIMERE a le statut d'outil national depuis 2007, il est utilisé par de nombreuses AASQAs, à l'échelle nationale (PREVAIR) et européenne (COPERNICUS). Il est également open-source (IPSL [7]).

Les dispositifs de surveillance in-situ (stations de mesures) implantés sur la région alimentent l'assimilation de données dans la modélisation. La combinaison géostatistique des données modélisées, qualifiées d'ébauches, avec les données mesurées permettent de produire une meilleure estimation, appelée "assimilation".

La modélisation du NH_3 est produite chaque jour, sans assimilation de données fautes de dispositif de surveillance. Les polluants réglementés tels que les particules fines (PM_{10} , $PM_{2.5}$), le dioxyde d'azote (NO_2) et l'ozone (O_3) disposent d'ébauches et de cartes assimilées produites à partir d'un historique de mesures.

L'action modélisation B2.2 à quatre objectifs principaux :

- Alimenter l'outil d'aide à la décision AgriVision'Air (B2.3).
- Alimenter quotidiennement et améliorer le système de prévisions de la qualité de l'air et la gestion d'épisodes de pollution (B4.3).
- Alimenter quotidiennement le système de surveillance (B4.2).
- Disposer d'un potentiel commun d'études (à posteriori) et de scénarios locaux et interrégionaux.

L'action modélisation (Partie B2 - Développement of digital tools, en vert) s'inscrit dans l'architecture globale du projet décrite dans la figure 1.1

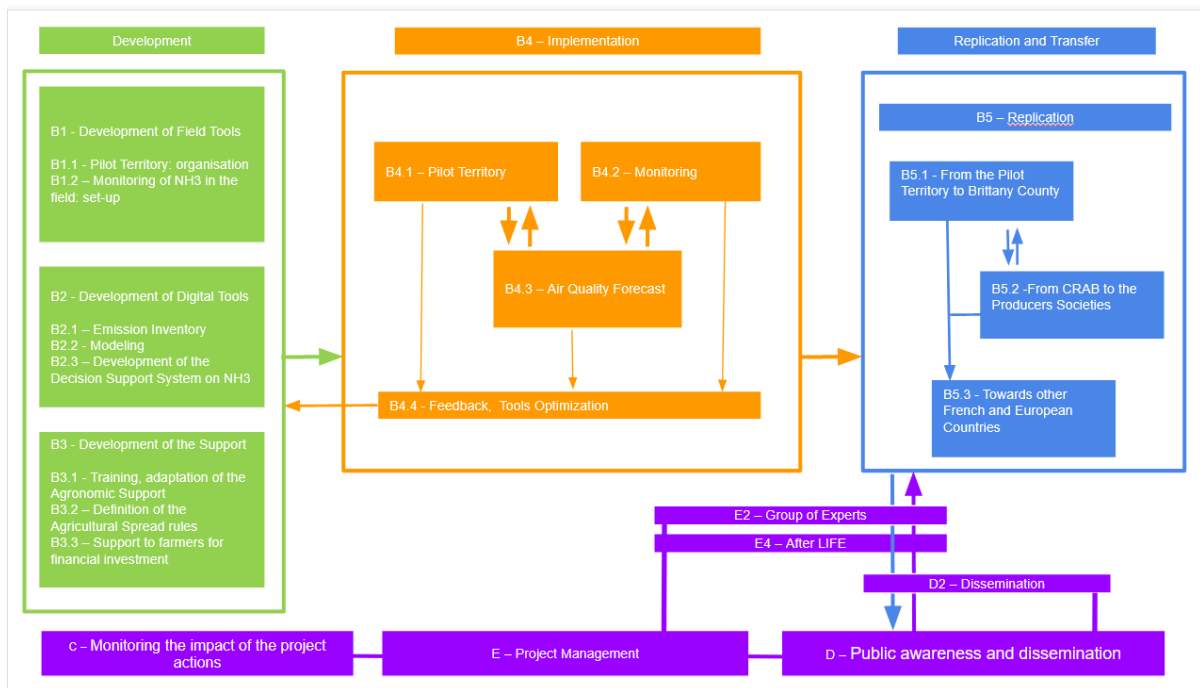


FIGURE 1.1 – Arbre organisationnel du projet ABAA. Toute les actions et les relations entres elles sont représentées

3 La volatilisation de l'ammoniac

Un des objectifs d'AgriVision'Air est d'informer quotidiennement les utilisateurs de cet outil sur l'état prévisionnel du pouvoir volatilisant de l'ammoniac dans l'air.

Ainsi, un indicateur de volatilisation simple, variant dans l'espace (échelle communale) et dans le temps (pour aujourd'hui J, demain J+1 et après-demain J+2) sera produit et fourni quotidiennement à partir des sorties du modèle météorologique prévisionnel MM5 de la plate-forme ESMERALDA. L'indice de volatilisation devra prendre en compte l'état des sols et de l'air dans la Couche Limite de Surface (CLS).

La volatilisation de l'ammoniac dépend de plusieurs facteurs, physico-chimiques et environnementaux, détaillés dans le Chapitre 3.

4 Evaluation des modélisations de l'ammoniac

L'évaluation des modélisations de l'ammoniac disponibles à ce jour (régionales ESMERALDA, françaises PREV'AIR et européennes COPERNICUS) sera réalisée par le biais de calculs de performances basés sur les mesures in-situ déployées sur le territoire breton ainsi que celles réalisées par les autres AASQA sur les régions du domaine Esmeralda.

Cette étude de comparaison modèles/mesures est effectuée :

- dans un premier temps sur l'ensemble du domaine ESMERALDA pour l'année de référence 2022 ;
- dans un second temps sur la région Bretagne pour la période printemps/été de l'année 2023, les mesures sur le territoire pilote de Brest (action B1) n'ayant démarrées qu'en mars 2023.

Les données de modélisation seront confrontées aux mesures au travers d'indicateurs statistiques communément utilisés dans les exercices d'évaluation de modélisation, détaillés dans le chapitre 7.

5 Assimilation de données et prévision statistique

Les modélisations régionales de l'ammoniac seront enrichies en exploitant les mesures in-situ déployées sur la Bretagne. La méthode d'assimilation de donnée fournie par Airparif, déployée et testée sur la région Bretagne est détaillée dans le chapitre 10.

Dans un second temps, la méthode d'assimilation sera couplée à de la prévision statistique pour obtenir un modèle de qualité de l'air prévisionnel qui intégrera le panel d'outils internes d'Air Breizh afin d'améliorer son processus de prévision et d'alerte à la pollution de l'air.

2 Prérequis techniques

Afin de réaliser l'action B2.2, une grande quantité de données est nécessaire :

- ESMERALDA fournit deux chaînes de calcul et un total de six modèles à différentes résolutions.
- COPERNICUS fournit 11 modèles européens et une prévision d'ensemble construite à partir de ces modèles.
- PREV'AIR fournit deux modèles.

Au total, c'est plus de 20 modèles 2D fournis au format netcdf et variant spatialement sur des domaines vastes. Les fichiers ont également une résolution temporelle d'une heure et contiennent quatre à huit jours de données.

Les données issues des modèles de pollution étant volumineuses et complexes, des outils numériques sont nécessaires pour les exploiter. L'équipe modélisation d'Air Breizh utilise principalement le langage python qui est adapté pour le calcul scientifique et également pour la gestion d'importants volumes de données.

1 Les outils numériques

1.1 Acquisition des données : Demetrios

Demetrios est un package python développé pour télécharger les modèles cités précédemment mais également dans l'optique d'être facilement amélioré afin de puiser dans différentes sources si besoin. La figure 2.1 décrit le principe de fonctionnement du package :

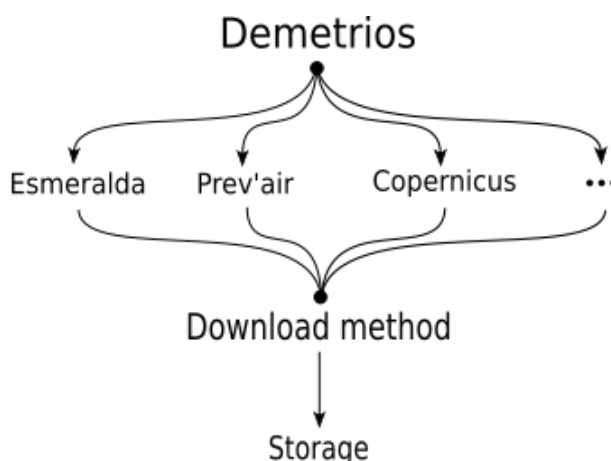


FIGURE 2.1 – Schéma de principe de Demetrios

Le package est composé d'une classe mère, de ses méthodes ainsi qu'une classe fille pour chaque modèle à télécharger. Chaque classe fille possède une méthode getFile utilisée pour télécharger la donnée. Un mail d'alerte est envoyé à l'équipe de modélisation d'Air Breizh en cas d'échec de récupération.

Les données sont téléchargées tous les jours et sont stockées sur un serveur. Ce dernier est dupliqué afin d'éviter toute perte.

De plus, Demetrios comprend des méthodes et des fonctions permettant d'automatiser la vérification de la présence et de l'intégrité des données. Une vérification hebdomadaire automatique est réalisée chaque fin de semaine et, en cas de fichier manquant, une nouvelle tentative de récupération est déclenchée.

1.2 Exploitation des données : Airpy

Lors de ce projet, Air Breizh a eu l'opportunité de collaborer avec AirParif, l'association en charge de la surveillance de la qualité de l'air en Île-de-France. Dans ce cadre, un package Python nommé Airpy, développé par Cyril Joly (AirParif), a été partagé et installé.

Cet outil permet d'accéder aux données stockées sur les serveurs d'Air Breizh au format d'origine netcdf et permet de les explorer au travers d'extraction temporelles ou encore de cartographies.

1.3 Analyse des performances de modélisation : ScoresModel

Le package ScoresModel, un outil de bilan statistique, a également été développé lors de ce projet afin de permettre une analyse modèle-mesure efficace. Ce package se base sur le package Airpy mais également sur l'outil evaltools fourni par le LCSQA.

ScoresModel permet de rassembler, à l'aide d'Airpy, les données de modélisation pour n'importe quel modèle stocké par Demetrios sur une période donnée. Le package se base également sur les outils internes d'Air Breizh pour récupérer les données de mesures sur la région Bretagne et peut prendre en compte des sources de données externes comme Geodair pour les mesures d'autres régions.

ScoresModel permet enfin de générer une sélection de graphiques en utilisant le package evaltools et ainsi d'analyser les performances des modèles. Il s'inscrit désormais dans le cadre du système de prévision d'Air Breizh en permettant une étude régulière des performances des modèles utilisés quotidiennement.

2 Utilisation des données

Ces données seront utilisées dans le cadre du projet ABAA pour répondre aux missions de l'action B2.2 :

- La création d'un indice de volatilisation qui viendra alimenter l'outil d'aide à la décision AgriVision'Air (Action B2.3).
- L'évaluation des modélisations disponibles. Les données seront analysées et comparées aux mesures sur le territoire national et pilote quand elles seront disponibles (Action B1, figure 1.1) afin de déterminer leurs performances respectives et d'éventuellement proposer des pistes d'amélioration.
- Elaboration d'un modèle assimilé à partir des modèles et des mesures disponibles, qui alimentera quotidiennement les systèmes de prévisions de la qualité de l'air et la gestion d'épisode de pollution (Action B4.3) et de surveillance (Action B4.2).

3 La volatilisation de l'ammoniac

Le phénomène de volatilisation se produit à l'interface Sol / Atmosphère selon les conditions physico-chimiques du sol et les conditions météorologiques locales. Cette volatilisation peut avoir lieu si de l'azote ammoniacal est disponible en surplus dans le sol. Les sources peuvent être naturelles (processus de décompositions, fixation par des micro-organismes) ou anthropiques (apports de fertilisants). Après volatilisation, la durée de vie de l'ammoniac (NH_3) dans l'atmosphère est relativement faible (de 2.8 heures à 4 jours) en raison de sa réactivité et de la rapidité de son dépôt sec. Cependant il joue un rôle de précurseurs de particules fines. En effet, l'ammonium particulaire (produit à partir de l'ammoniac en partie) à une durée de vie plus importante (7 à 19 jours).

Après un apport d'engrais dans le sol, la volatilisation de l'ammoniac (NH_3) dépend de plusieurs phénomènes physico-chimiques, illustrés Figure 3.1 :

- La dissolution de l'engrais dans le sol s'il s'agit d'un engrais minéral.
- Un équilibre acido-basique (équation 3.1) entre l'ammonium (NH_4^+) sous forme aqueuse et l'ammoniac (NH_3 sous forme aqueuse) qui dépend de la température et du pH du sol.
- Un équilibre de solubilité (équation 3.2) entre l'ammoniac (NH_3 sous forme aqueuse) et l'ammoniac (NH_3 sous forme gazeuse), dépendant de la température du sol.
- Des conditions météorologiques locales dans la couche atmosphérique à la surface du sol.

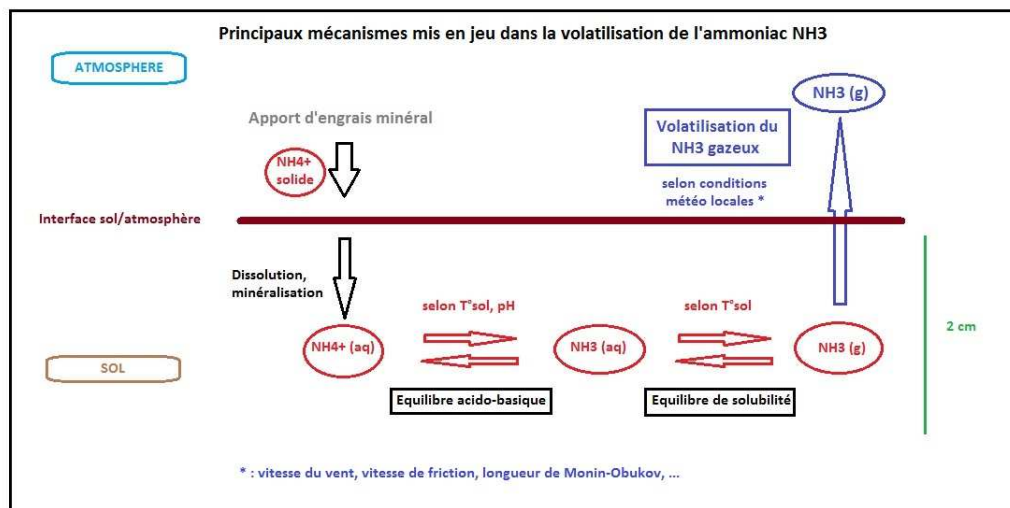
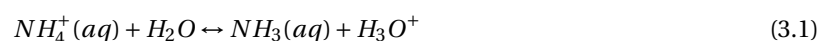


FIGURE 3.1 – Mécanismes engendrant la volatilisation de l'ammoniac (Rapport Nuage, Sanchez, 2019 [13])

L'équilibre acido-basique est décrit par l'équation suivante :



L'équilibre de solubilité quand à lui est exprimé par la relation suivante :



Plusieurs paramètres peuvent affecter fortement la volatilisation de l'ammoniac :

Le type de sol et la nature de l'engrais

Des études ont démontré que le type de sol affecte la volatilisation de l'ammoniac après un apport d'engrais (Thompson et al., 1990 [19]). En plus du type de sol, le pH est également un facteur primordial dans la volatilisation de l'ammoniac. En effet, l'équilibre acido-basique (équation 3.1) est très sensible au pH et une augmentation de celui-ci favorise la transformation de l'ammonium aqueux (NH_4^+) en ammoniac (NH_3 aqueux).

Le type d'engrais à un effet sur la volatilisation sous plusieurs aspects :

- La quantité d'azote ammoniacal présente dans les engrais varie en fonction de leur nature : organique ou minérale (les engrais organiques en sont plus riches), limitant ou accentuant ainsi la disponibilité d'ammoniac dans le sol et ainsi sa volatilisation.
- Les engrais peuvent avoir un pH différent et donc un effet acidifiant ou alcalinisant sur le sol (Génermont and Cellier, 1997 [5]) (Sommer et al., 2003 [17]). La volatilisation de l'ammoniac a lieu principalement le premier jour suivant l'application de l'engrais (Hafner et al., 2018 [6]) et celle-ci est généralement plus importante si le sol a un pH basique (Bussink et al., 1994 [3]).

Les pratiques culturales ont également un impact conséquent. Outre le type d'engrais utilisé (comme évoqué ci-dessus), la manière d'appliquer ces engrais sur la parcelle agricole influe sur le phénomène de volatilisation. Par exemple, un engrais enfouit, interagissant moins avec l'atmosphère, sera moins susceptible de se volatiliser qu'un engrais appliqué en surface (en contact de l'interface Sol / Atmosphère).

Les paramètres météorologiques locaux

En raison de l'influence de la température du sol sur les équilibres physico-chimiques de l'ammoniac (équations 3.1 et 3.2), celle-ci a une importance sur le phénomène de volatilisation de l'ammoniac. Une augmentation de la température du sol, favorisant la transformation de l'ammonium aqueux (NH_4^+ aqueux) en ammoniac (NH_3 aqueux puis gazeux) est synonyme d'une augmentation de la volatilisation (Hafner et al., 2018 [6]).

La vitesse de vent favorise également la volatilisation (Sommer et al., 1991 [16]), jusqu'à un certain point où le vent peut assécher le sol et ainsi réduire les émissions d'ammoniac (Garcia et al., 2012 [4]) (Sommer and Olesen, 2000 [15]). Egalement, des études ont montré que la pluie et l'humidité réduisent l'intensité de la volatilisation (Sommer et al., 1991 [16]).

Enfin, les conditions de stabilité dans la couche atmosphérique de surface sont également importantes dans le processus de volatilisation. Une atmosphère instable présente des conditions favorables à la volatilisation. Elles peuvent être évaluées à l'aide de paramètres empiriques tels que la longueur de Monin-Obukhov (LMO), décrite dans la partie 4.2. La LMO dépend de plusieurs paramètres, dont notamment de la température du sol, du flux vertical de quantité de mouvement (assimilable à la vitesse de l'écoulement), de la vitesse de frottement et du flux de chaleur du sol vers l'atmosphère (dépendant de la nature du sol).

Ainsi, l'indice prévisionnel de volatilisation de l'ammoniac, qui sera fourni à l'outil AgriVision'Air, s'appuyera sur ce paramètre fondamental de la dynamique de la Couche Limite Atmosphérique (CLA) du domaine de la micro-météorologie, calculé dans chaque modèle météorologique prévisionnel.

Ce choix favorisera également une réplique de cet indicateur de volatilisation sur d'autres territoires.

4 Etude de la stabilité atmosphérique

1 Présentation de la couche limite (Lambert, 2012 [8])

1.1 La Couche Limite Atmosphérique (CLA)

La Couche Limite Atmosphérique (CLA) est la couche de l'Atmosphère où l'influence directe de la surface (terres, mers, lacs, ...) est encore ressentie à l'échelle de la journée. Elle est caractérisée par des transferts d'énergie entre la surface et l'atmosphère.

Les transferts d'énergie dans la CLA se font par l'intermédiaire des :

- Flux de chaleur latente.
- Flux de chaleur sensible.
- L'énergie cinétique des mouvements turbulents.

Les niveaux de pollution dans l'atmosphère sont fortement conditionnés par les conditions météorologiques. Les polluants émis sont dispersés par :

- le transport horizontal provoqué par le champ de vent.
- le mélange vertical par la turbulence atmosphérique liée aux effets de couche limite.

La CLA est la partie de l'atmosphère qui est directement soumise aux effets de surface : effets de relief, propriétés radiatives du sol, turbulences. Le temps de réponse à un forçage (transfert de chaleur, friction, évaporation) y est de l'ordre de l'heure.

La turbulence dans la CLA joue un rôle essentiel dans les échanges verticaux puisqu'elle permet les échanges de chaleur et le mélange des polluants.

Un bon exemple est fourni par le cycle diurne de la température dans la CLA, illustré Figure 4.2. Alors que la température est quasiment constante dans l'atmosphère libre (AL), elle est soumise à la succession du jour et de la nuit dans la CLA. Cette variation n'est pas due directement au cycle du rayonnement solaire absorbé mais à la variation du flux de chaleur turbulent généré au niveau du sol par ce rayonnement.

1.2 Bilan radiatif de la surface terrestre et de l'atmosphère

Le flux de chaleur reçu à la surface terrestre Q , exprimé en $W.m^{-2}$ s'écrit :

$$Q = Q_E + Q_H + Q_G \quad (4.1)$$

Flux de chaleur latente Q_E

C'est la chaleur échangée (avec changement de phase) entre le sol et l'atmosphère. Le flux de chaleur latente correspond au transfert d'humidité du sol vers l'atmosphère. Il peut être positif (évaporation) ou négatif (rosée).

Flux de chaleur sensible Q_H

C'est la chaleur échangée (sans changement de phase) entre le sol et l'atmosphère. Ce flux est fonction de la température du sol, de sa nature et de son humidité. L'énergie solaire non utilisée pour l'évaporation va provo-

quer une élévation de la température du sol, ayant pour effet d'augmenter le flux de chaleur sensible.

Flux de chaleur dans le sol Q_G

C'est la chaleur échangée entre l'atmosphère et le sol. Ce flux dépend du gradient vertical de température et de la conductivité du sol. La conductivité du sol dépend la nature du sol et de l'humidité.

1.3 Stratification thermique et stabilité de la CLA

La troposphère est définie comme étant la couche d'atmosphère partant de la surface et dans laquelle la température diminue avec l'altitude. Cependant, dans la partie basse de cette couche, la couche limite atmosphérique peut être caractérisée par des variations différentes de la température avec l'altitude.

Ainsi les profils verticaux de température permettent de caractériser la stabilité de l'atmosphère. En météorologie, la température potentielle a été définie afin d'évaluer cette stabilité.

La température potentielle θ

La température potentielle θ , exprimée en *Kelvin*, est la température qu'aurait une particule d'air sec de Température T si elle était ramenée de façon adiabatique (sans échange de chaleur) au niveau de référence P_0 (1 000 hPa). Elle est calculée de la manière suivante :

$$\theta = T \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-\frac{R}{M_a C_p}} \quad (4.2)$$

Avec :

- T , la température (K) et P , la pression (Pa) au niveau z où se trouve la particule d'air.
- P_0 , la pression de référence au niveau du sol = 1 000 hPa.
- R , la constante des gaz parfaits = $8.314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$.
- M_a , la masse molaire de l'air = 28.9 kg.mol^{-1} .
- C_p , la capacité calorifique de l'air sec a pression constante = $1\,004.7 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$.

L'analyse du gradient vertical de la température potentielle ($\frac{\partial \theta}{\partial z}$) permet de comparer des masses d'air situées à des niveaux différents et d'analyser la stabilité des couches atmosphériques.

Dans la réalité, l'air est humide et est ainsi défini comme un mélange d'air sec et de vapeur d'eau. Or la quantité de vapeur d'eau présente dans l'air est très variable dans le temps et l'espace contrairement aux gaz atmosphériques majoritaires qui constituent l'air sec (Azote, Oxygène, Argon, gaz carbonique). La notion de masse molaire est donc difficile à évaluer.

La solution utilisée en météorologie est de considérer l'air humide comme de l'air sec de masse molaire M_a mais en apportant une correction à la température pour tenir compte de la présence variable de vapeur d'eau. C'est la température virtuelle, exprimée en *Kelvin* :

$$T_v = (1 + 0.61r)T \quad (4.3)$$

Où r est le rapport de mélange, représentant la quantité de vapeur d'eau présente dans l'air par unité de masse d'air sec ($\text{kg}_{\text{eau}}.\text{kg}_{\text{airsec}}^{-1}$).

Ainsi la température potentielle virtuelle, exprimée en *Kelvin*, a été définie afin d'évaluer la stabilité atmosphérique pour de l'air humide. C'est la température potentielle que l'air sec doit atteindre pour qu'il ait la même masse volumique que celle de l'air humide à la même pression.

$$\theta_v = T_v \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-\frac{R}{M_a \cdot C_p}} \quad (4.4)$$

Au niveau du sol, $\theta_{v0} = T_{v0}$.

1.4 La Couche Limite Atmosphérique de Surface (CLS)

Au voisinage du sol, l'écoulement d'air est quasi-stationnaire et les forces de pression et de Coriolis peuvent être négligées. Le domaine de validité de cette condition définit la Couche Limite de Surface (CLS). Les flux de chaleur sensible et latente sont conservatifs ("modèle à flux constant") et égaux à ceux du sol. Son épaisseur est de l'ordre de la dizaine de mètres. C'est la zone de la CLA dont la structure est la plus explorée et donc la mieux connue car elle est facile d'accès pour l'expérimentateur.

1.5 Evolution typique de la stabilité au cours d'une journée

Les Figures 4.1 et 4.2 présentent un exemple d'évolution typique de la stabilité d'une couche limite continentale avec un ciel clair sans nuage au cours de la journée :

- En milieu d'après-midi, la température du sol est maximale par l'action du rayonnement solaire. L'air est plus chaud au niveau du sol que dans la CLS ($t = 15$ heures sur la Figure 4.2). Un transport turbulent de chaleur a lieu du sol vers l'atmosphère (profil sur-adiabatique $\frac{\partial \theta}{\partial z} < 0$) et réchauffe la CLA.
- En début de nuit, le sol se refroidit par rayonnement. L'air au contact du sol se refroidit progressivement, avec développement d'une couche d'inversion thermique qui peut atteindre quelques centaines de mètres. ($t = 24$ et 6 heures sur la Figure 4.2). Le flux de chaleur est dirigé de l'atmosphère vers le sol, le transport de chaleur vertical n'existe plus (profil sous-adiabatique $\frac{\partial \theta}{\partial z} > 0$) et l'air est stable près du sol. Les polluants émis dans cette couche d'inversion ont du mal à se disperser. Ceux émis au-dessus ne peuvent arriver au sol.
- En début de journée, le sol se réchauffe par rayonnement, le flux de chaleur s'inverse (sol vers l'atmosphère) et l'air se réchauffe. Une couche convective se forme près du sol et s'épaissit au fur et à mesure du réchauffement du sol. (passage de $t = 6$ h à $t=15$ h sur la Figure 4.2) Les polluants émis au sol vont rapidement se mélanger et se disperser pendant la journée.

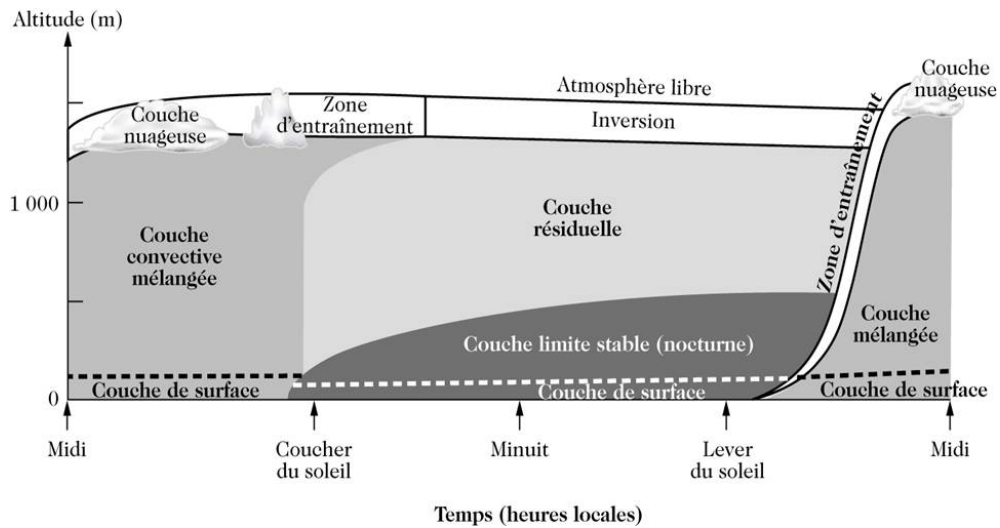


FIGURE 4.1 – Evolution typique de la hauteur de la CLA au cours d'une journée (Stull, 1998 [18])

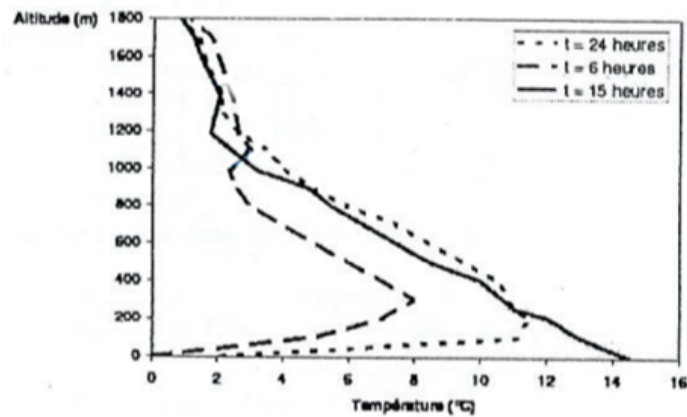


FIGURE 4.2 – Evolution typique du profil de température dans la CLA au cours d'une journée (Lambert, 2012 [8])

2 Théorie de similitude de Monin-Obuhkov (Wilson, 2013 [20])

Pour la plupart des situations, nous ne savons pas dériver des solutions basées sur les équations de conservation (Navier-Stokes, ...). Cependant, des observations montrent des caractéristiques reproductibles. La théorie de la similitude donne un moyen de grouper et d'organiser les variables afin de mettre en évidence des relations empiriques descriptives de la CLA.

2.1 La théorie de la similitude

La théorie de la similitude est basée sur l'organisation des variables en groupes adimensionnés. Le fait de former ces groupes permet de réduire le nombre de degré de liberté du problème (résolution des équations de conservation trop complexe).

Méthodologie

Les quatre étapes pour construire une description dans le cadre de la théorie de la similitude sont :

- 1. Choix des variables pertinentes.
- 2. Définition des groupes de variables sans dimensions.
- 3. Recherche de relations empiriques entre ces groupes à partir d'observations.
- 4. Exprimer une "loi" basée sur une équation obtenue par régression ou approximations successives.

Le résultat de cette approche est une équation empirique reliant plusieurs groupes de variables pertinentes pour une situation donnée. Une telle "loi" entre deux groupes de variables adimensionnés s'appelle une relation de similitude.

Ces relations, si elles existent, sont déterminées empiriquement, sur la base d'observations ou sur des hypothèses a priori.

Une fois établies, les relations de similitude permettent de diagnostiquer les profils du vent, de température potentielle, d'humidité, etc ... sans qu'il soit nécessaire de résoudre les équations de conservation (Navier-Stokes, ...).

2.2 La théorie de Monin-Obuhkov dans la CLS

La similitude de Monin-Obuhkov (Monin and Obukhov, 1954 [11]) est applicable à la Couche Limite de Surface (CLS), caractérisée par des flux considérés constants (ne dépendent pas de la hauteur dans la CLS, égaux à ceux du sol).

L'analyse dimensionnelle appliquée par Monin-Obuhkov aux principales grandeurs physiques qui caractérisent la CLS a introduit un paramètre fondamental de la dynamique, ayant la dimension d'une longueur, permettant de caractériser la stabilité de l'atmosphère dans la couche de surface : la longueur de Monin-Obuhkov, LMO.

La longueur de Monin-Obuhkov, exprimée en *metre*, représente le rapport des effets de flottabilité sur les effets de cisaillement du vent. Elle prend en compte les conditions atmosphériques dans la couche de surface mais également les caractéristiques du sol (température, humidité, etc) au travers notamment de la vitesse de friction et du flux de chaleur du sol vers l'atmosphère :

$$LMO = - \frac{u^{*3} \cdot T_0}{\kappa \cdot g \cdot \frac{Q}{\rho \cdot C_p}} \quad (4.5)$$

Avec :

- u^* , la vitesse de friction ($m.s^{-1}$). Elle dépend de la nature du sol et de la vitesse de l'écoulement (contrainte de cisaillement de Reynolds).
- u^{*2} , le flux vertical de quantité de mouvement ($m^2.s^{-2}$).
- κ , la constante de von Karman = 0.4 (sans unité).
- g , l'accélération de la pesanteur g au sol = $9.81 m.s^{-2}$.
- T_0 , la température moyenne constante dans la CLS (K).
- Q , le flux de chaleur turbulent constant dans la CLS ($W.m^{-2}$).
- C_p , la capacité calorifique de l'air sec à pression constante = $1\,004.7 J.K^{-1}.kg^{-1}$.
- ρ , la masse volumique de l'air = $1.292 kg.m^{-3}$.

Et où $\frac{Q}{\rho.C_p}$ est appelé le "flux de température vertical"

La formulation de la longueur de Monin-Obuhkov a évolué en prenant en compte la température potentielle virtuelle, valable pour le cas de l'air humide :

$$LMO = -\frac{u^{*3}.\theta_{v0}}{\kappa.g.\frac{Q}{\rho.C_p}} \quad (4.6)$$

Où θ_{v0} est la température potentielle virtuelle moyenne dans la CLS.

Ainsi, les relations de similitude proposées par Monin-Obuhkov permettent d'exprimer dans la CLS les profils de cisaillement, de température potentielle, etc en fonction du paramètre de stabilité adimensionné $\zeta = \frac{z}{LMO}$:

$$\zeta = \frac{z}{LMO} \begin{cases} < 0 & CLS \text{ instable} \\ = 0 & CLS \text{ neutre} \\ > 0 & CLS \text{ stable} \end{cases} \quad (4.7)$$

Exemple de la relation de similitude pour le cisaillement en CLS non neutre, exprimé en $m.s^{-1}$:

$$U = \frac{u^*}{\kappa} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) + \beta.\zeta \right] \quad (4.8)$$

Où :

- z_0 est la longueur de rugosité (m). Elle est définie comme la hauteur à laquelle le vent s'annule.
- β est un paramètre déterminé expérimentalement à partir de profils de vent mesurés.

5 Analyse des données fournies par ESMERALDA

1 Données météo MMOUT

Des données météorologiques analysées issues du modèle MM5 sont fournies tous les jours sur le domaine GN5 (grille de 5 km de résolution) de J-1 à J+2 au format netcdf. Ces fichiers contiennent de nombreux paramètres nécessaires pour caractériser les conditions atmosphériques sur 15 niveaux verticaux.

Ce modèle est distribué par le National Center for Atmospheric Research (NCAR) de l'université de Pennsylvanie. C'est un modèle non hydrostatique à aire limitée capable de prévoir les phénomènes météorologiques à meso-échelle L ($10 < L < 1\,000$ km). Il est alimenté par les prévisions du modèle Global Forecasting System (GFS) du National Centers for Environmental Prediction (NCEP). Ce modèle a été développé en langage Fortran et est open-source (NCAR [12]).

2 Exploitation des données par ESMERALDA

Les données météorologiques mentionnées dans la partie précédente sont exploitées par ESMERALDA à l'aide de scripts Fortran 90, également fournis. L'une des fonctions de ces scripts est le calcul de paramètres météorologiques en des points récepteurs spécifiques, nommés "stations virtuelles", notamment aux coordonnées géographiques des stations météorologiques RADOME de Météo France. Les données 2D sont ainsi interpolées pour chacune de ces "stations virtuelles" et fournies tous les jours sous forme de séries temporelles (de J-1 à J+2).

Dans le cadre du projet ABAA, les extractions en séries temporelles ne sont pas suffisantes. En effet, une donnée couvrant l'intégralité du domaine est nécessaire pour livrer une information pertinente aux utilisateurs de l'application AgriVision'Air. Dans ce but, les scripts de calcul d'ESMERALDA ont été analysés afin de reproduire la méthode de calcul des paramètres atmosphériques et de l'appliquer sur une grille 2D. Les données temporelles aux stations virtuelles seront cependant utilisées afin de valider les résultats de la réplique du calcul.

3 L'application du calcul de la LMO par ESMERALDA

La méthode de calcul utilisée par ESMERALDA pour produire les séries temporelles a été retranscrite en Python.

L'équation de la LMO (4.6) est appliquée à une altitude théorique de référence appelée "ztherm", correspondant à la hauteur de la couche limite de surface :

$$LMO = - \frac{u^{*3} \cdot \theta_{vz_{therm}}}{\kappa \cdot g \cdot \frac{Q_{z_{therm}}}{\rho \cdot C_p}} \quad (5.1)$$

Où :

- "ztherm" est le sommet théorique de la CLS = 25 m.
- $\theta_{vz_{therm}}$, température potentielle virtuelle (K) à l'altitude ztherm = θ_{v0} moyenne dans la CLS.
- $Q_{z_{therm}}$ flux de chaleur à l'altitude ztherm = flux au niveau du sol = $Q_E + Q_H + Q_G$ ($W \cdot m^{-2}$) (hypothèse initiale de la CLS : "modèle à flux constant").

La formulation de l'équation dans le code Fortran est la suivante :

$$LMO = - \frac{u^{*3} \cdot potts}{\kappa \cdot g \cdot potf} \quad (5.2)$$

Où :

- u^* , la vitesse de friction ($m \cdot s^{-1}$). Elle dépend de la nature du sol et de la vitesse de l'écoulement (contrainte de cisaillement de Reynolds).
- κ , la constante de von Karman = 0.4 (sans unité)
- g , l'accélération de la pesanteur g au sol = $9.81 m \cdot s^{-2}$
- $potts$ est la température potentielle virtuelle (K) calculée à l'altitude z_{therm} et correspond à $\theta_{vz_{therm}}$.
- $potf$ correspond au flux de chaleur turbulent constant dans la CLS $\frac{Q_{z_{therm}}}{\rho \cdot C_p}$ ($W \cdot m^{-2}$).

3.1 Calcul des variables intermédiaires

Afin de calculer la longueur LMO, le comportement de variables nécessaires telles que la pression, la température potentielle et l'altitude doivent être calculées en amont.

Le gradient vertical de la pression atmosphérique

Le champ de pression vertical, fonction de l'altitude z , doit être calculé en chaque maille de grille météorologique. Le gradient de pression est toujours négatif avec l'augmentation de l'altitude, diminuant d'une pression au niveau sol p^* ou $pstar$ jusqu'à une pression au sommet de l'atmosphère $ptop$.

Afin de fixer les conditions aux limites ($z = 0$ et $z = ztop$, sommet de l'atmosphère) du champ de pression, la pression est bornée de $pstar$ à $ptop$ où :

$$pstar(i, j) = psol - ptop$$

Et en appliquant la théorie des coordonnées "sigma" : l'atmosphère est décrite en niveaux verticaux, caractérisés par le rapport de la pression au niveau vertical sur la pression au sol.

Où :

- $\sigma(0) = 1$ ($z=0$ correspondant à la surface).
- $\sigma(z_{top}) = 0$ ($z=z_{top}$ correspondant au sommet de l'atmosphère).

Les sorties du modèle météorologique fournissent une description de l'atmosphère sur 15 niveaux verticaux, nommés par la suite "k".

Le champ vertical de pression atmosphérique est ainsi exprimé en *Pascal* de la manière suivante :

$$pr(i, j, k) = pref(i, j, k) + prep(i, j, k) \quad \text{Où} \quad pref(i, j, k) = pstar(i, j) \cdot \sigma(i, j, k) + ptop$$

Avec :

- $pref$, la pression de référence à l'altitude z .
- $prep$, la perturbation de pression à l'altitude z .
- $ptop$, la pression au sommet de l'atmosphère (condition limite).
- $pstar$, la pression au sol (condition limite).
- σ , la coordonnées sigma décrivant le pression relative par rapport à la pression de surface $pstar$.

Conditions aux limites : (1) $z = 0$

$$\begin{aligned} pref(i, j, 0) &= pstar(i, j) \cdot \sigma(0) + ptop \implies pref(i, j, 0) = pstar(i, j) + ptop \\ &\implies pref(i, j, 0) = psol \end{aligned}$$

Conditions aux limites : (2) $z = z_{top}$

$$pref(i, j, z_{top}) = pstar(i, j) \cdot \sigma(z_{top}) + ptop \implies pref(i, j, z_{top}) = ptop$$

Les perturbations de pression $prep$ et les conditions aux limites $pstar$ et $ptop$ sont obtenues à partir des extractions du modèle météorologiques MM5.

La température potentielle

La température pour l'air sec $th(i, j, k)$ et la température potentielle pour l'air humide $po(i, j, k)$ (Cf. section 1.3) sont exprimées de la manière suivante :

$$th(i, j, k) = te(i, j, k) \cdot \left(\frac{pr(i, j, k)}{P_0} \right)^{-x_k}$$

Avec :

- $te(i, j, k)$, la temperature (K), fournie par le modèle météorologique.
- $pr(i, j, k)$, la pression (Pa) calculée précédement .
- P_0 , la pression de référence au niveau du sol = 1 000 hPa.
- x_k , une constante égale à $\frac{R}{M_a \cdot C_p}$.

$$po(i, j, k) = th(i, j, k) \cdot (1 + 0.61 * qr(i, j, k) - wa(i, j, k))$$

Où :

- qr , le rapport de mélange de la vapeur d'eau ($kg_{eau} \cdot kg_{airsec}^{-1}$), soit le contenu en eau disponible par unité d'air (Cf. section 1.3).
- wa , le rapport de mélange de la vapeur d'eau ($kg_{eau} \cdot kg_{airsec}^{-1}$) assimilée par la physique des nuages (formation des nuages, précipitation sous forme d'eau et de glace), soit le contenu en eau retirée de la masse d'air dans la colonne atmosphérique :

$$wa(i, j, k) = cl(i, j, k) + ci(i, j, k) + wr(i, j, k)$$

Avec :

- cl , le rapport de mélange des nuages ($kg_{eau} \cdot kg_{airsec}^{-1}$), soit la quantité d'eau par unité d'air assimilée pour la formation des nuages.
- ci , le rapport de mélange de la glace ($kg_{eau} \cdot kg_{airsec}^{-1}$), soit la quantité d'eau par unité d'air. assimilée pour la formation de la glace à partir des nuages
- wr le rapport de mélange de l'eau de pluie ($kg_{eau} \cdot kg_{airsec}^{-1}$) soit la quantité d'eau par unité d'air assimilée pour la formation de précipitation à partir des nuages.

L'altitude des couches

La position relative des couches du modèle est paramétrée à l'aide des niveaux sigma mentionnés précédemment. La position du centre des couches est exprimée par le paramètre $sigm$ tandis que $sigm1$ correspond à la position du bas de la couche (Figure 5.1). $sigm1$ est exprimé à partir de $sigm$ de la manière suivante :

$$sigm1(i + 1) = \max(0, sigm1(i) - 2 * (sigm1(i) - sigm(i)))$$

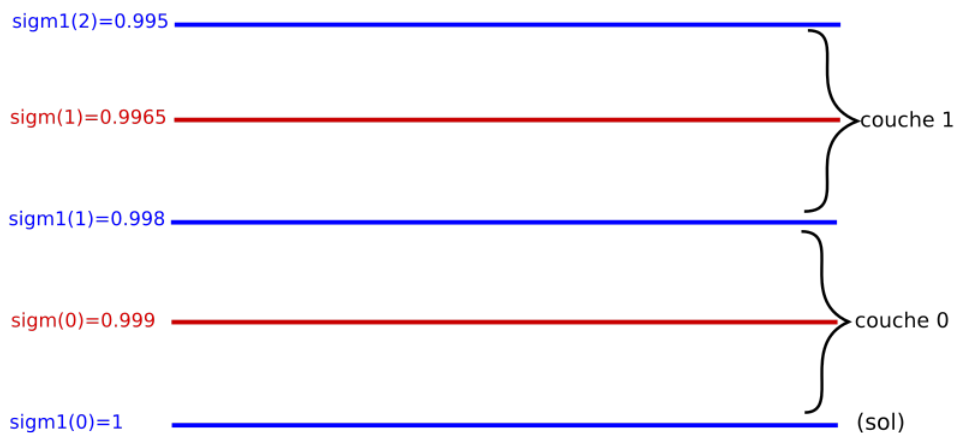


FIGURE 5.1 – Schéma des niveaux $sigm$ et $sigm1$.

L'altitude $alti(i, j, k)$, exprimée en *metre*, est calculée par itération à partir des niveaux verticaux et de l'épaisseur des couches (Cf. figure 5.2), elle-même déterminée à partir des conditions thermodynamiques (température et pression) de chaque couche :

$$alti(i, j, k+1) = alti(i, j, k) + thick(i, j, k)$$

Et

$$alti1(i, j, k) = alti(i, j, k) + thick1(i, j, k)$$

Où :

- La variable $thick$ est l'épaisseur totale de la couche d'un niveau vertical k (m). Elle est calculée à partir de la température de référence de la couche et du différentiel de pression entre le niveau $sigm1(k)$ et le niveau $sigm1(k+1)$:

$$thick = \frac{r}{g} \cdot t_{ref} \cdot \log\left(\frac{(pstar(i, j).sigm1(k) + ptop)}{(pstar(i, j).sigm1(k+1) + ptop)}\right)$$

- La variable $thick1$ est l'épaisseur d'une demi-couche d'un niveau vertical k (m). Elle est calculée à l'aide des niveaux $sigm1(k)$ et $sigm(k)$:

$$thick1 = \frac{r}{g} \cdot t_{ref} \cdot \log\left(\frac{(pstar(i, j).sigm1(k) + ptop)}{(pstar(i, j).sigm(k) + ptop)}\right)$$

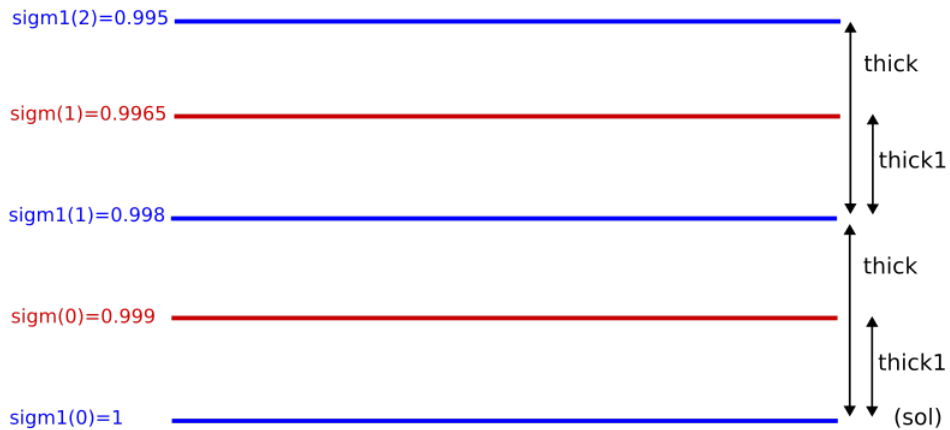


FIGURE 5.2 – Schéma des niveaux $sigm$ et $sigm1$ et des épaisseurs $thick$ et $thick1$.

La variable $alti$ est l'altitude de chaque bas de couche et est calculée par itération à l'aide de l'altitude du niveau précédent et de l'épaisseur de couche $thick$. La variable $alti1$ correspond donc à l'altitude du milieu de la couche et est calculée à partir de l'altitude du bas de la couche $alti$ et de l'épaisseur de demi-couche $thick1$. (Figure 5.3)

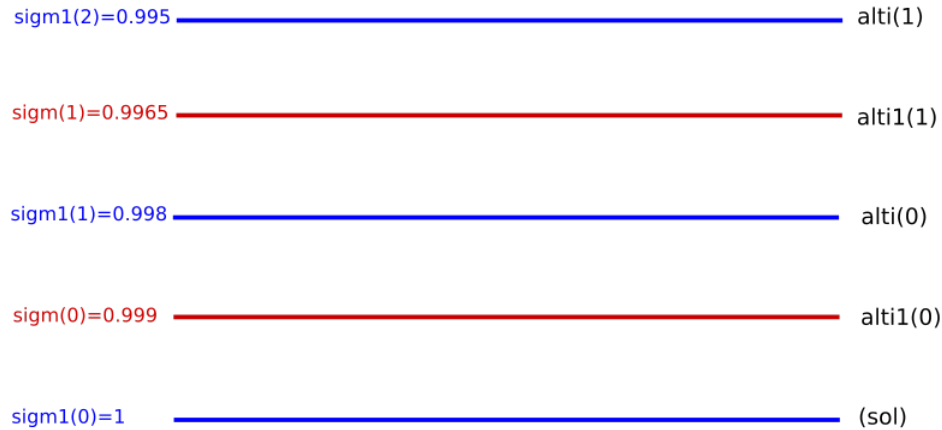


FIGURE 5.3 – Schéma des niveaux sigma et sigma1 et des altitudes alti et alti1.

L'expression de l'épaisseur de couche et donc de l'altitude de chaque niveau vertical permet de prendre en compte le relief du terrain (niveau de la mer, massifs montagneux, etc.).

3.2 Calcul du flux de chaleur Sol / Atmosphère *potf*

La variable *potf* correspond au flux vertical total de chaleur entre le sol et l'atmosphère et est assimilé au flux de chaleur total reçu à la surface terrestre Q (Cf. equation 4.1) est exprimé de la manière suivante :

$$Q = Q_H + Q_E + Q_G$$

$$potf = \overbrace{heat.(1 + 0.61.qr(0))} + \overbrace{humf.0.61.th(0)} + \overbrace{\frac{r}{C_p.pr(0)}.t_{2m}}$$

Où :

$$heat = \frac{r}{C_p}.t_{2m} \frac{flsh}{pr(0)}$$

$$humf = \frac{r}{L_v}.t_{2m} \frac{fllh}{pr(0)}$$

Avec :

- *heat*, le flux de chaleur sensible au niveau du sol.
- *humf*, le flux de chaleur latente au niveau du sol.
- r , est la constante spécifique de l'air = $287.04 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$.
- C_p , la capacité calorifique de l'air sec à pression constante = $1004.7 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$.
- L_v , la chaleur latente (J.kg^{-1}).
- t_{2m} , la température à 2 mètres (K).
- $qr(0)$, le rapport de mélange de la vapeur d'eau ($\text{kg}_{eau}.\text{kg}_{airsec}^{-1}$).

- $th(0)$, la température potentielle pour l'air sec au niveau du sol (K).
- $pr(0)$, la pression au niveau du sol (Pa).

3.3 Calcul de la température potentielle virtuelle à l'altitude z_{therm} $potts$

La variable $potts$ est calculée pour l'altitude z_{therm} . Le calcul est effectué en utilisant la température potentielle virtuelle aux altitudes encadrant z_{therm} (c'est à dire $altitude_k < z_{therm} < altitude_{k+1}$). En pratique, $potts$ est calculée dans la deuxième couche de l'atmosphère mais ce n'est pas toujours le cas en fonction du relief du terrain.

L'équation de $potts$ est la suivante :

$$potts(i, j) = po(i, j, k) + \frac{(po(i, j, k+1) - po(i, j, k)) \cdot (z_{therm} - alti1(i, j, k))}{(alti1(i, j, k+1) - alti1(i, j, k))}$$

- po , la température potentielle virtuelle pour l'air humide (K).
- z_{therm} , l'altitude de la CLS fixée à 25m.
- $alti1$, l'altitude du milieu des couches (m).

3.4 Calcul de la LMO et du paramètre de stabilité

Une fois les variables intermédiaires calculées, l'équation 5.2 est utilisée pour déterminer la LMO. Celle-ci est ensuite utilisée pour calculer le paramètre de stabilité $\zeta = \frac{z}{LMO}$ en utilisant $z = z_{therm} = 25m$.

4 Comparaison des résultats

Dans le but de valider la réplique du calcul de LMO, les résultats ont été comparés aux extractions des séries temporelles fournies par l'équipe ESMERALDA. Cette extraction contient un grand nombre de paramètres météorologiques, dont la LMO, extrait par une méthode d'interpolation bilinéaire en des points récepteurs spécifiques, notamment aux coordonnées des stations de mesure Météo France du domaine.

Les données issues de la réplique sont calculées sur une grille 2D, puis extraites avec une méthode d'interpolation linéaire afin de pouvoir les comparer avec les séries temporelles d'ESMERALDA. De légers écarts dans les résultats sont possibles.

Les résultats ont été comparés en 13 points récepteurs sur l'ensemble du domaine ESMERALDA aux situations géographiques différentes. Les résultats pour six de ces points récepteurs sont présentés dans la suite du rapport. Trois sont des villes côtières (Le Havre, Cherbourg et Dinard) et trois sont des villes situées à l'intérieur des terres (Saint Jacques de la Lande (Rennes), Paris et Lille).

Les figures 5.4 à 5.9 représentent le paramètre de stabilité $\zeta = \frac{z}{LMO}$ pour les différents points récepteurs provenant des séries temporelles fournies par ESMERALDA et des résultats sur la grille 2D extraits via l'outil Airpy (Air Breizh).

Si les profils ont des allures similaires, avec des profils journaliers correspondant dans l'ensemble au cycle jour / nuit illustré partie 4.1.5, il y a cependant des différences, pour certaines villes, sur l'amplitude du paramètre de stabilité. Ces différences peuvent s'expliquer par :

- La méthodologie de calcul de la LMO :
 - dans le cas des séries temporelles d'ESMERALDA, les variables nécessaires sont d'abord interpolées (interpolation bilinéaire) aux points récepteurs avant de calculer la LMO.
 - dans le cas du recalcul en Python, toutes les computations sont effectuées sur le domaine 2D et l'interpolation aux points récepteurs n'est réalisée que sur le paramètre LMO en fin de traitement lors de l'extraction par Airpy.
- Le langage de programmation (Fortran / Python) et la méthode d'affectation des variables (gestion des arrondis des variables intermédiaires).
- La typologie de la zone géographique, caractérisée par la vitesse de friction avec le sol (u^*) illustrée figure 5.10. Cette dernière peut varier fortement d'une maille à l'autre en fonction de la nature du sol (zone rurale, urbaine, océanique, ...) et provoque une variabilité spatiale de z/LMO (illustrée figure 5.11).

Ainsi la variabilité spatiale de la LMO a un impact sur les résultats aux points récepteurs à partir d'une interpolation linéaire de mailles couvrant différents types de surface (urbaine, agricole, océanique, ...). Les différences sont particulièrement visibles pour les points récepteurs situés sur la côte (Le Havre, Cherbourg) ou en bordure d'une zone urbaine (Lille et Rennes-Saint Jacques de la Lande).

La chaîne de calcul développée dans le cadre de ce projet est validée. Aucune interpolation entre mailles ne sera réalisée lors du calcul de l'indice de volatilisation.

Attention particulière : le calcul de la LMO appliqué dans le cadre de ce projet n'est valide que pour les mailles continentales (Scire et al., 2000 [14]). Les mailles océaniques seront ignorées dans le calcul de l'indice de volatilisation (Cf. Chapitre 6).

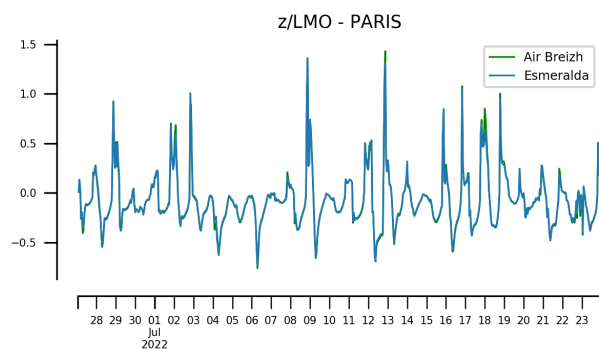


FIGURE 5.4 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour la ville de Paris

TABLE 5.1 – Corrélations pour Paris

	Air Breizh
Esmeralda	0.997185

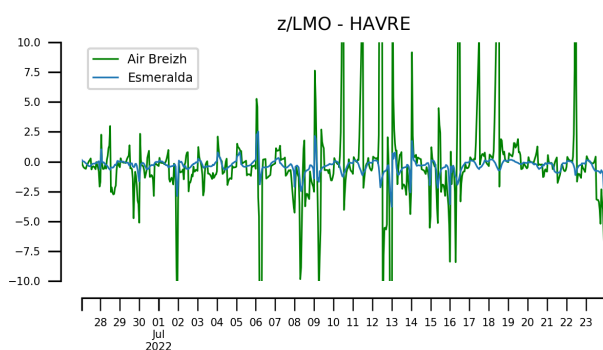


FIGURE 5.5 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour le Havre

TABLE 5.2 – Corrélations pour Havre

	Air Breizh
Esmeralda	0.167269

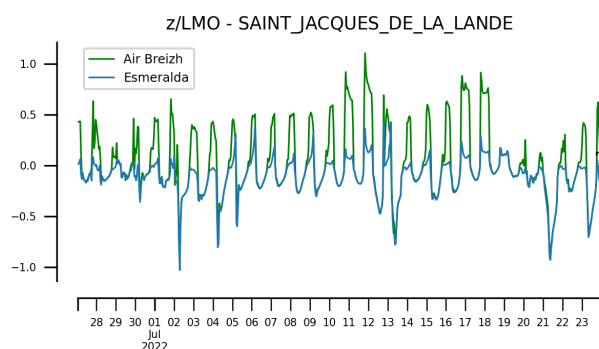


FIGURE 5.6 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Saint Jacques de la Lande

TABLE 5.3 – Corrélations pour Rennes-Saint_Jacques

	Air Breizh
Esmeralda	0.843571

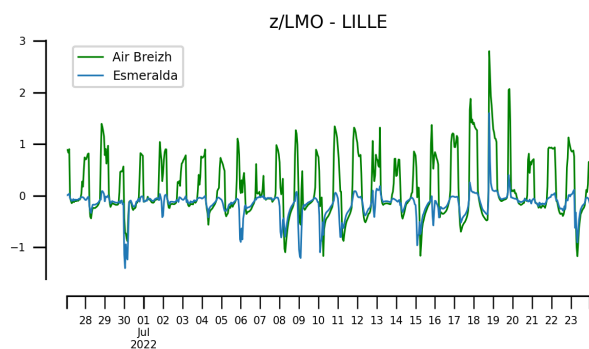


FIGURE 5.7 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Lille

TABLE 5.4 – Corrélations pour Lille

	Air Breizh
Esmeralda	0.599885

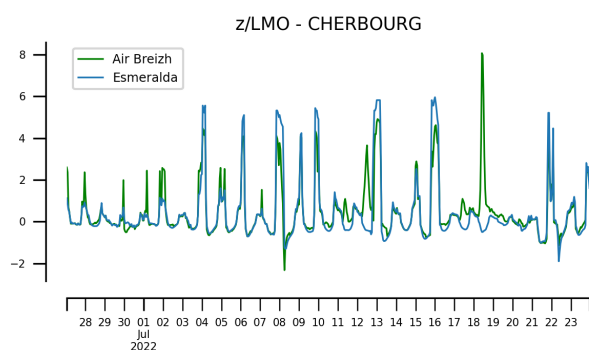


FIGURE 5.8 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Cherbourg

TABLE 5.5 – Corrélations pour Cherbourg

	Air Breizh
Esmeralda	0.801758

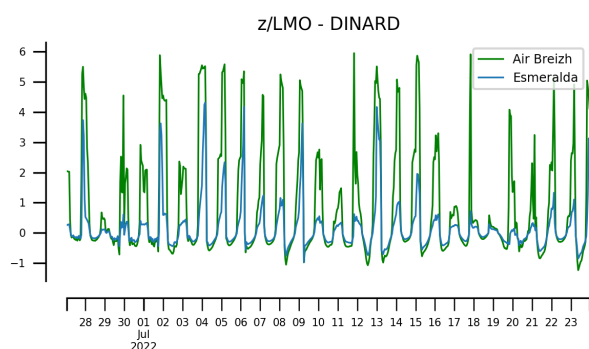


FIGURE 5.9 – Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Dinard

TABLE 5.6 – Corrélations pour Dinard

	Air Breizh
Esmeralda	0.831085

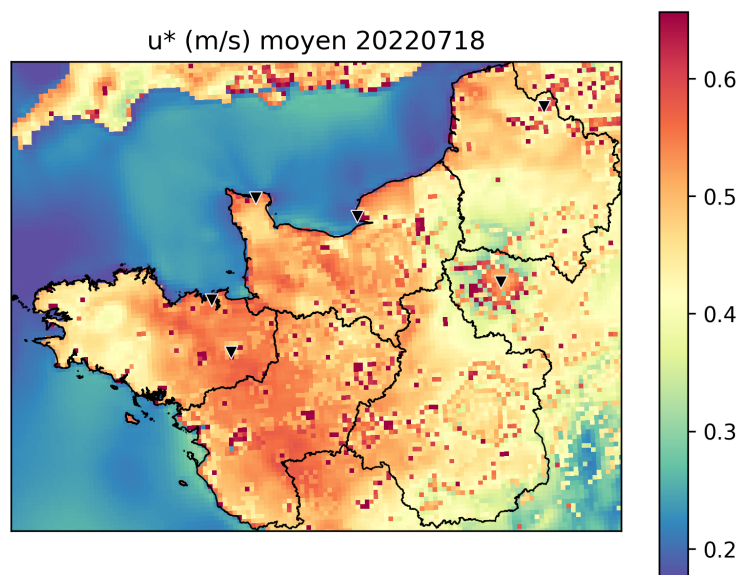


FIGURE 5.10 – Carte de la vitesse de friction u^* ($m.s^{-1}$) en moyenne journalière pour le 18-07-2022

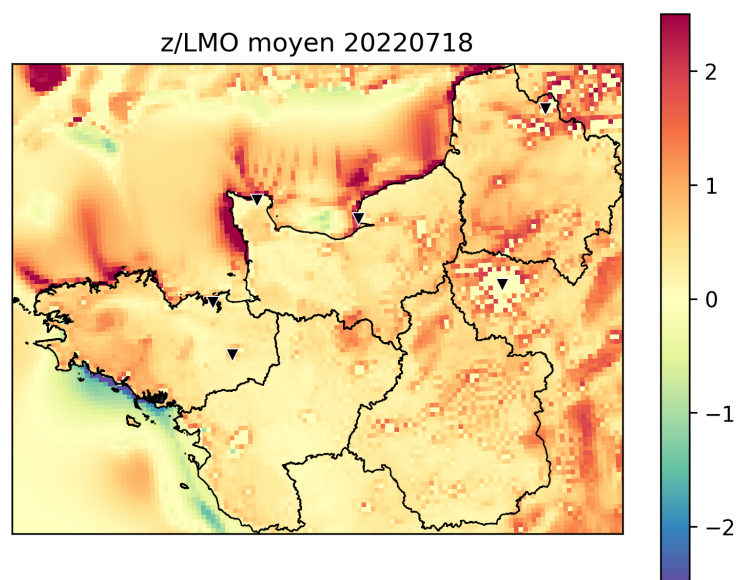


FIGURE 5.11 – Cartographie de l'indicateur de stabilité pour le 18-07-2022

6 Elaboration de l'indice de volatilisation

1 Calcul de l'indice de volatilisation

1.1 Choix des paramètres pris en compte

Un grand nombre de paramètres ont une influence sur la volatilisation de l'ammoniac, dont certains sont liés au sol (pH, nature et température; Cf. chapitre 3). L'indice élaboré dans ce chapitre a pour objectif de caractériser si les conditions atmosphériques sont propices à la volatilisation de l'ammoniac. Il est catégorisé en quatre classes :

- Indice = 1 ; Volatilisation faible.
- Indice = 2 ; Volatilisation neutre.
- Indice = 3 ; Volatilisation modérée.
- Indice = 4 ; Volatilisation forte.

Stabilité de la couche atmosphérique

La stabilité atmosphérique est exprimée par le paramètre $\zeta = \frac{z}{LMO}$ explicité plus haut (section 2) :

$$\zeta = \frac{z}{LMO} \begin{cases} < 0 & CLS \text{ instable} \\ = 0 & CLS \text{ neutre} \\ > 0 & CLS \text{ stable} \end{cases} \quad (6.1)$$

Dans le cadre de l'indice de volatilisation, une CLS est considérée neutre pour $-0.1 < \zeta < 0.1$. Une atmosphère instable signifie que les conditions sont propices à la volatilisation (indices 3 et 4), une atmosphère neutre est également neutre vis-à-vis de la volatilisation (indice 2) et une atmosphère stable n'est pas favorable à la volatilisation (indice 1).

Cycle jour-nuit

Le paramètre *swdown*, le flux solaire incident (Figure 6.1) est utilisé pour différencier le jour et la nuit. Le paramètre de stabilité ζ étant majoritairement positif la nuit, seules les heures en journées seront prises en compte pour le calcul de l'indice. Les pas horaires considérés pour le calcul sont donc tous ceux présentant un flux solaire *swdown* supérieur à 0. Le cycle diurne est donc essentiellement un filtre appliqué sur les données météorologiques.

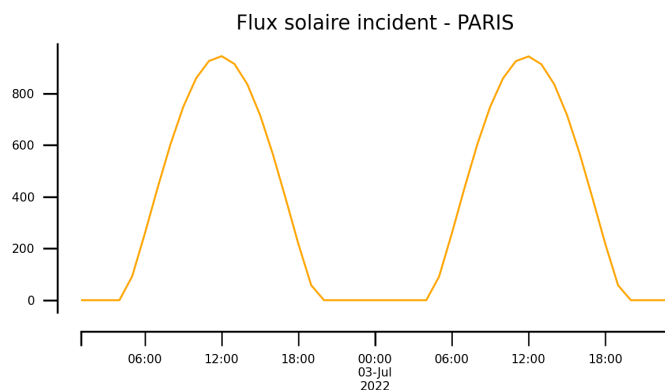


FIGURE 6.1 – Illustration de la variation du flux solaire incident modélisé à Paris

Précipitations

Les précipitations influencent la volatilisation en lessivant l'atmosphère. En cas de précipitations abondantes, les polluants présents dans l'atmosphère sont ramenés au sol, le NH_3 ne peut plus se volatiliser et l'indice est fixé à 1.

La quantité de précipitations à partir duquel le lessivage de l'atmosphère influe sur la volatilisation, seuil de précipitations appelé par la suite S_p , sera déterminée à l'aide de tests de sensibilité.

Vent

La volatilisation de l'ammoniac augmente avec l'intensification du vent (jusqu'à un certain point comme expliqué dans le chapitre 3).

- La volatilisation est considérée modérée (indice 3) pour une atmosphère instable ($\zeta < -0.1$).
- La volatilisation est considérée forte (indice 4) à partir d'un seuil de vent pour une atmosphère instable.

Le seuil de vent, appelé par la suite S_v , sera déterminé à l'aide de tests de sensibilité.

1.2 Méthode de calcul de l'indice

L'indice de volatilisation est calculé à partir des données MM5 sur une grille de même dimension. L'indice est (1) calculé pour chaque pas horaire, (2) agrégé à la journée puis (3) à l'échelle de la commune.

Calcul de l'indice horaire

L'indice est calculé pour chaque pas horaire et pour chaque maille avec l'algorithme suivant :

- S'il fait nuit, le pas horaire n'est pas considéré.
- Si les précipitations sont **supérieures au seuil S_p** , la volatilisation est faible (**Indice = 1**).
- Si le $\zeta < -0.1$ (**instable**) ET que le **vent est supérieur au seuil S_v** , la volatilisation est forte (**Indice = 4**).
- Si le $\zeta < -0.1$ (**instable**) mais que le **vent est inférieur au seuil S_v** , la volatilisation est modérée (**Indice = 3**).
- Si le $\zeta > 0.1$ (**stable**), la volatilisation est faible (**Indice = 1**).
- Si aucun de ces critères n'est rencontré, la situation est considérée neutre vis-à-vis de la volatilisation ; **Indice = 2**.

Les résultats possibles sont illustrés dans la table 6.1.

TABLE 6.1 – Table rassemblant les différentes combinaisons possibles de seuils et de paramètre de stabilité

Vent	Pluie	Paramètre de stabilité ζ	Indice	Qualificatif indice
$< S_v$	$< S_p$	> 0.1 (stable)	1	Faible
$< S_v$	$< S_p$	< -0.1 (instable)	3	Modérée
$< S_v$	$< S_p$	0 (neutre)	2	Neutre
$< S_v$	$> S_p$	> 0.1	1	Faible
$< S_v$	$> S_p$	< -0.1	1	Faible
$< S_v$	$> S_p$	0	1	Faible
$> S_v$	$< S_p$	> 0.1	1	Faible
$> S_v$	$< S_p$	< -0.1	4	Forte
$> S_v$	$< S_p$	0	2	Neutre
$> S_v$	$> S_p$	> 0.1	1	Faible
$> S_v$	$> S_p$	< -0.1	1	Faible
$> S_v$	$> S_p$	0	1	Faible

Création de l'indice journalier et communal

L'indice journalier est l'indice horaire le plus représenté pour la journée considérée.

Enfin, l'indice communal est l'indice le plus représenté parmi les mailles en contact avec la commune.

1.3 Fourniture de l'indice de volatilisation

Ces indices sont ensuite enregistrés pour chaque échéance dans un fichier au format json comprenant le code EPCI, le code communal, le code département et l'indice du jour. Ce fichier est ensuite mis à disposition via une API.

2 Tests de sensibilité de l'indice de volatilisation

Afin de fixer les seuils S_v et S_p , des tests ont été effectués du 01-01-2022 au 14-08-2022 pour 13 villes bretonnes. Les gammes de valeurs testées sont présentées dans la table 6.2 :

TABLE 6.2 – Caractérisation des tests de sensibilité effectués

	gamme de valeur	unité
Pluie	$S_p = [0.2 ; 8]$	millimètres de pluie (mm)
Vent	$S_v = [1 ; 8]$	mètres par secondes (m/s)

Les résultats sont présentés par la suite et permettront de fixer les seuils.

2.1 Résultats des tests de sensibilité pour le seuil de pluie S_p

Le seuil S_p est étudié en comparant les résultats tout autre paramètre constant. L'effet de ce seuil sur l'indice de volatilisation est de forcer l'indice horaire à 1 (volatilisation faible). En effet, comme vu dans le chapitre 3, la volatilisation de l'ammoniac diminue avec l'augmentation des précipitations.

Les figures 6.3 montrent que le nombre d'indice égal à 1 augmente faiblement en diminuant le seuil S_p . L'occurrence de l'indice 1 pour la période étudiée varie de 3 % pour un seuil de 5 mm par heure à 7 % pour un seuil plus contraignant de 0.2 mm par heure.

Cette faible évolution de l'indice s'explique par le fait que l'indice journalier est égal à l'indice horaire le plus représenté sur la journée.

La figure 6.2 représente le nombre de jours où des précipitations sont modélisées en fonction du nombre de pas horaires concerné sur la journée. Par exemple, neuf jours sur la période étudiée comprenaient quatre pas horaires pluvieux.

Une journée ne compte que rarement plus de quatre heures de pluie. En effet, 77% des journées pluvieuses comportent quatre pas horaire ou moins sur la période étudiée, ce qui est insuffisant pour que l'indice journalier soit considéré faible.

De plus, ce seuil n'a pas un effet uniforme sur l'année. En effet, une journée ne comprend pas le même nombre de pas horaire diurne en fonction de la période de l'année considérée. La même proportion de pas horaire pluvieux en Janvier (journée plus courte) n'aura pas le même impact qu'en Août.

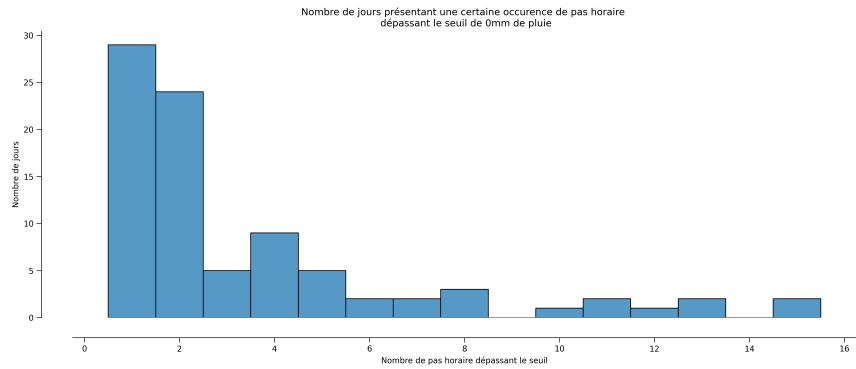


FIGURE 6.2 – Histogramme du nombre de jours comprenant un certain nombre de pas horaire dépassant un seuil S_p donné. Le seuil est fixé à 0 pour analyser le nombre de pas horaire "pluvieux" dans une journée typique.

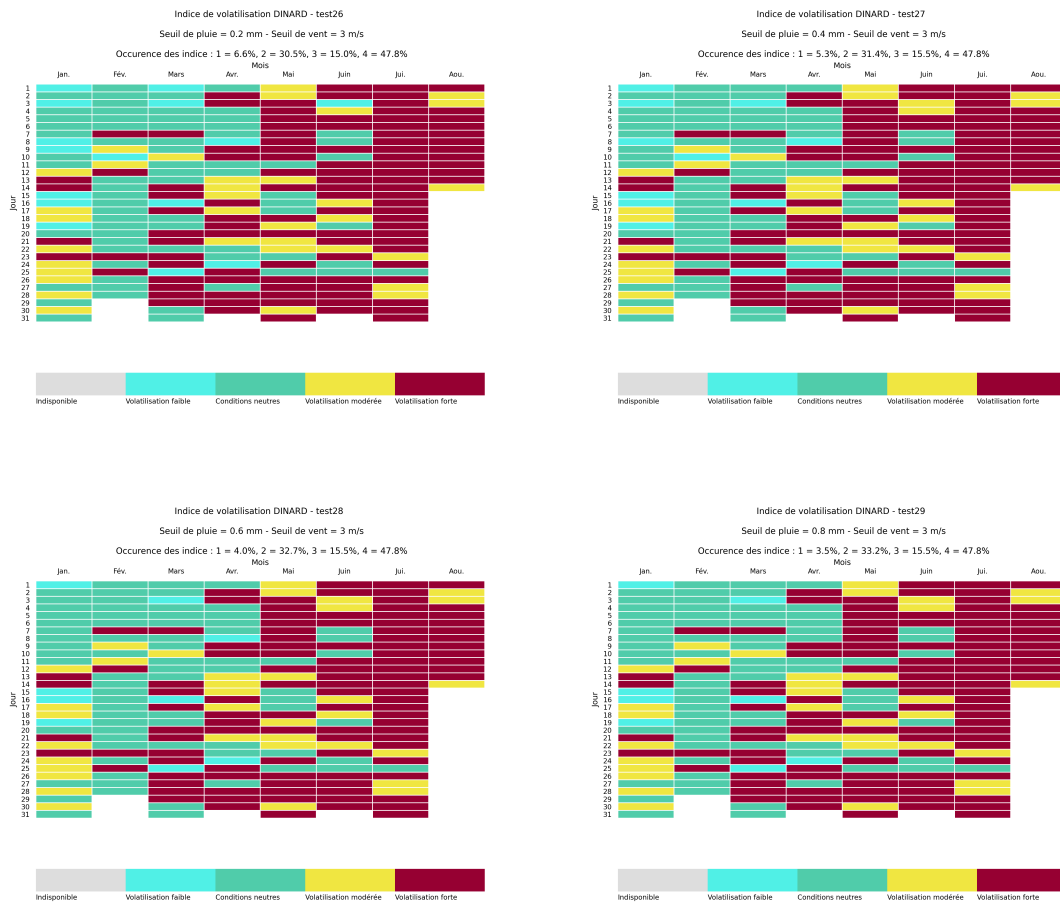




FIGURE 6.3 – Indice de volatilisation pour Dinard pour les tests où $S_p = [0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9, 1, 2, 3, 4 \text{ et } 5] \text{ mm}$ (S_v constant = 3 m/s).

2.2 Résultats des tests de sensibilité pour le seuil de vent S_v

Le seuil S_v est étudié en comparant les résultats tout autre paramètre constant. L'effet de ce seuil sur l'indice de volatilisation est de faire varier pour une situation caractérisée d'instable un indice 3 à 4, c'est à dire d'une situation de volatilisation modérée à une volatilisation forte. Il est donc important que ce seuil soit adapté pour que les indices 3 et 4 soient représentés dans les résultats.

En météorologie, les vents peuvent être catégorisés de la manière suivante (MeteoFrance [10]) :

- Vent nul de 0 à 0.5 m/s.
- Vent faible jusqu'à 3 m/s.
- Vent modéré jusqu'à 8 m/s.
- Vent fort jusqu'à 20 m/s.
- Vent très fort pour les vents supérieurs à 20 m/s.

Par exemple, pour le test 1 (Figure 6.4 avec $S_v = 1$ m/s soit un vent faible) les indices 3 (volatilisation modérée) et 4 (volatilisation forte) représentent respectivement 1 % et 63 % des indices journaliers pour la période étudiée. Dans la mesure où l'indice 4 doit représenter une situation extrême en terme de volatilisation, 1 m/s n'est pas un seuil adapté. Réciproquement, pour le test 32 (Figure 6.4 avec $S_v = 8$ m/s soit un vent à la limite du vent fort) les indices 3 et 4 représentent respectivement 63 % et 0 % des indices journaliers sur la période étudiée.

Un seuil de 5 m/s, correspondant à une valeur moyenne de la catégorie "vent modéré", engendre sur les 13 points récepteurs étudiés une moyenne de 12% d'indice 4 (table 6.3).

Deux cas particuliers ressortent de ces tests sur le territoire breton :

- L'occurrence de l'indice 4 à Rennes et Saint Jacques de la Lande est faible par rapport aux autres points récepteurs (respectivement 5,8 et 0,9%) en raison d'une proportion de vent supérieurs à 5 m/s plus faible. (14% contre en moyenne 30% pour les autres points récepteurs).
- L'occurrence de l'indice 1 est plus important à Camaret que pour les autres points récepteurs (24%). Après plusieurs tests, les précipitations ont été écartées comme cause de ce phénomène. Il s'agit d'une illustration d'une des limites de notre méthodologie. Camaret est une commune en contact avec des mailles principalement océaniques mais le calcul de la LMO (partie 4.2) implémenté n'est adapté qu'aux zones continentales.

TABLE 6.3 – Occurrences de chaque indice de volatilisation pour un seuil S_v de 5 m/s pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022.

Site	Volatilisation faible	Volatilisation neutre	Volatilisation modérée	Volatilisation forte
RENNES GALLET	2.7%	37.6%	54.0%	5.8%
RENNES-ST JACQUES	1.3%	46.5%	51.3%	0.9%
DINARD	3.1%	35.0%	50.0%	11.9%
PONTIVY AERODROME	4.9%	28.8%	51.3%	15.0%
LORIENT-LANN BIHOUE	5.3%	28.3%	56.2%	10.2%
VANNES-SENE	3.1%	32.7%	54.0%	10.2%
CAMARET	24.3%	23.0%	33.2%	19.5%
LANDIVISIAU	5.8%	35.4%	46.0%	12.8%
BREST-GUIPAVAS	5.8%	38.5%	43.4%	12.4%
QUIMPER	4.4%	32.7%	52.7%	10.2%
MERDRIGNAC	1.8%	30.1%	50.0%	18.1%
ST BRIEUC	2.2%	37.2%	47.3%	13.3%
LANNION_AERO	4.9%	38.1%	42.5%	14.6%
MERLEAC	3.1%	32.7%	47.3%	16.8%

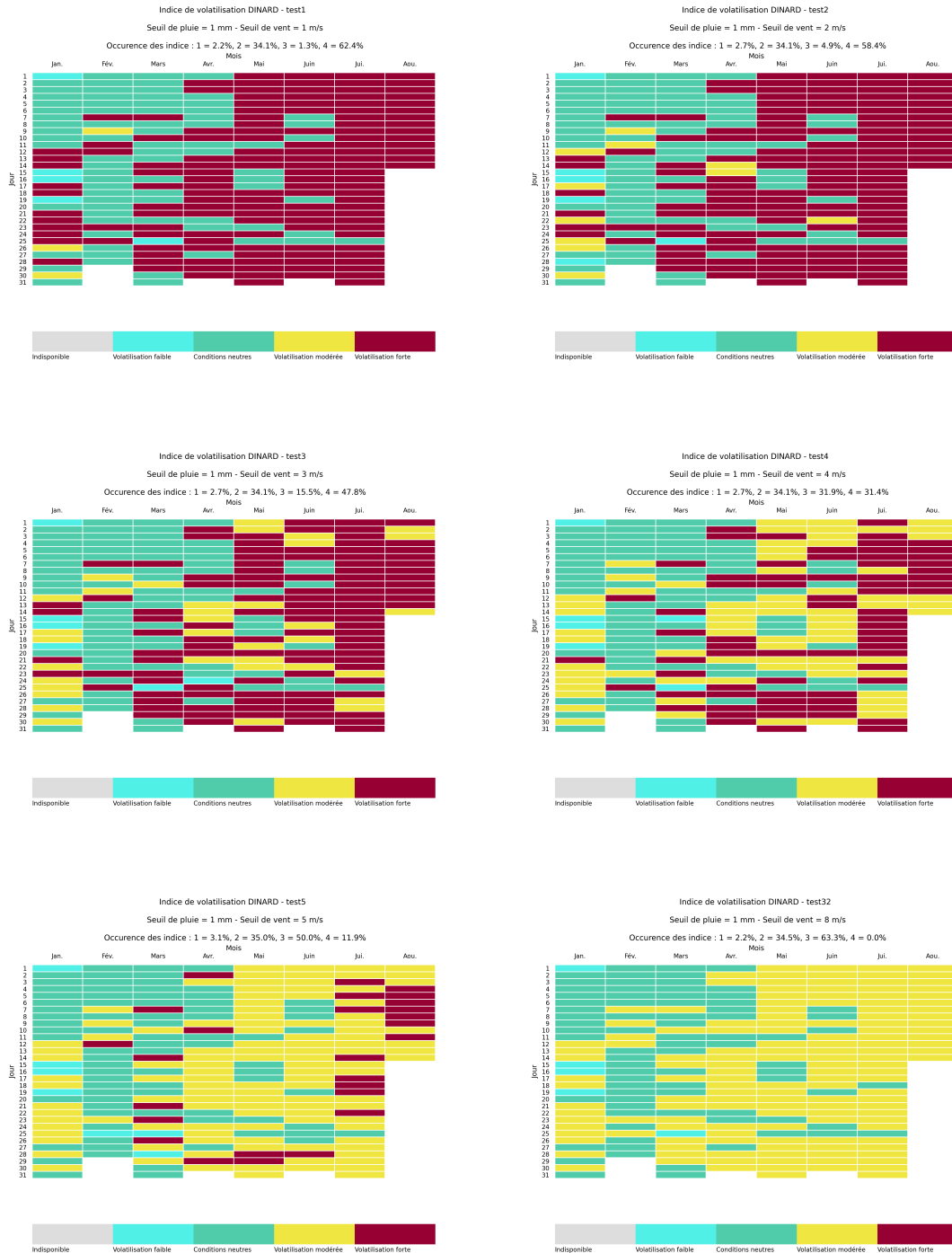


FIGURE 6.4 – Indice de volatilisation pour Dinard pour les tests où $S_v = [1, 2, 3, 4, 5, 8] \text{ m/s}$ (S_p constant = 1 mm)

2.3 Conclusion des tests et choix des seuils S_p et S_v

Seuil S_p

Le seuil S_p influence l'indice en le forçant à 1 dans le cas où une majorité de pas horaire dépasse ce seuil. L'effet diminue en augmentant le seuil et se stabilise au-dessus de 1 mm de pluie par heure.

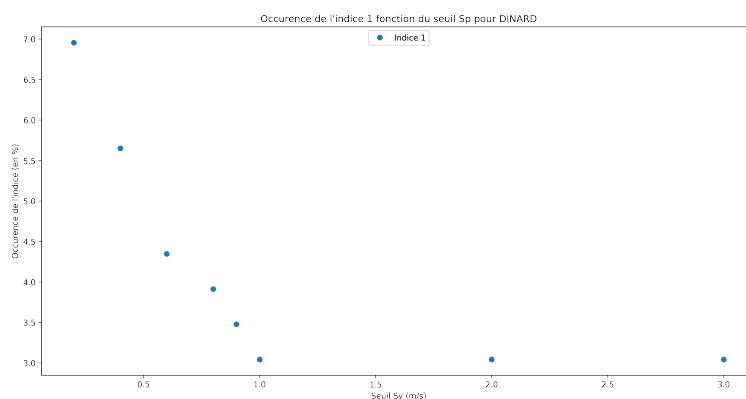


FIGURE 6.5 – Occurrences des indices 1 en pourcentage du nombre total d'indice pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022 et en fonction du seuil S_p

Le seuil S_p est fixé à 0.4 mm.

Seuil S_v

Le seuil S_v fait évoluer, s'il est dépassé, un indice 3 à 4 et illustre l'effet du vent sur la volatilisation de l'ammoniac. Le nombre d'indice 3 augmente donc avec la valeur du seuil S_v . La figure 6.6 montre que l'indice est toujours égal à 3 lorsque S_v est supérieur ou égal à 8 m/s.

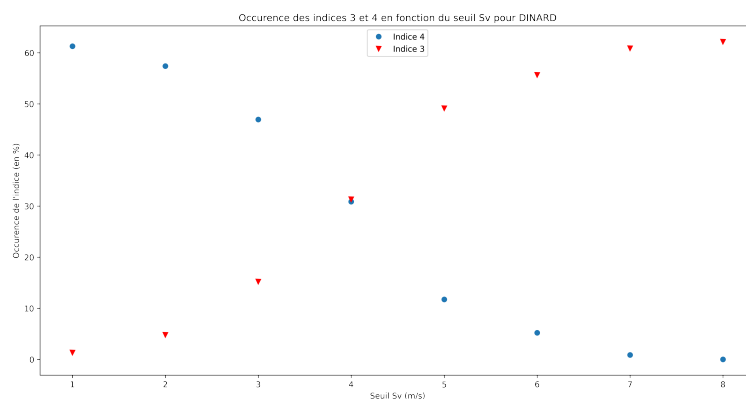


FIGURE 6.6 – Occurrences des indices 3 (en rouge) et 4 (en bleu) en pourcentage du nombre total d'indice pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022 et en fonction du seuil S_v

Au vu de ces résultats et pour conserver une proportion d'indice 4 cohérente, le seuil S_v est fixé à 5 m/s.

3 Conclusion : Intégration de l'indice de volatilisation dans AgriVision'Air

L'application AgriVision'Air est connectée au système de prévision quotidienne de la qualité de l'air d'Air Breizh et permet à l'utilisateur de connaître l'état de l'air sur la page d'accueil. L'indice de volatilisation est utilisé pour calculer l'impact théorique des pratiques agricoles et permet à l'agriculteur d'estimer ses pertes d'ammoniac lors d'un épandage.

La figure 6.7 illustre l'application AgriVision'Air (Action B2.3) disponible sur <https://www.agrivisionair.fr/>.

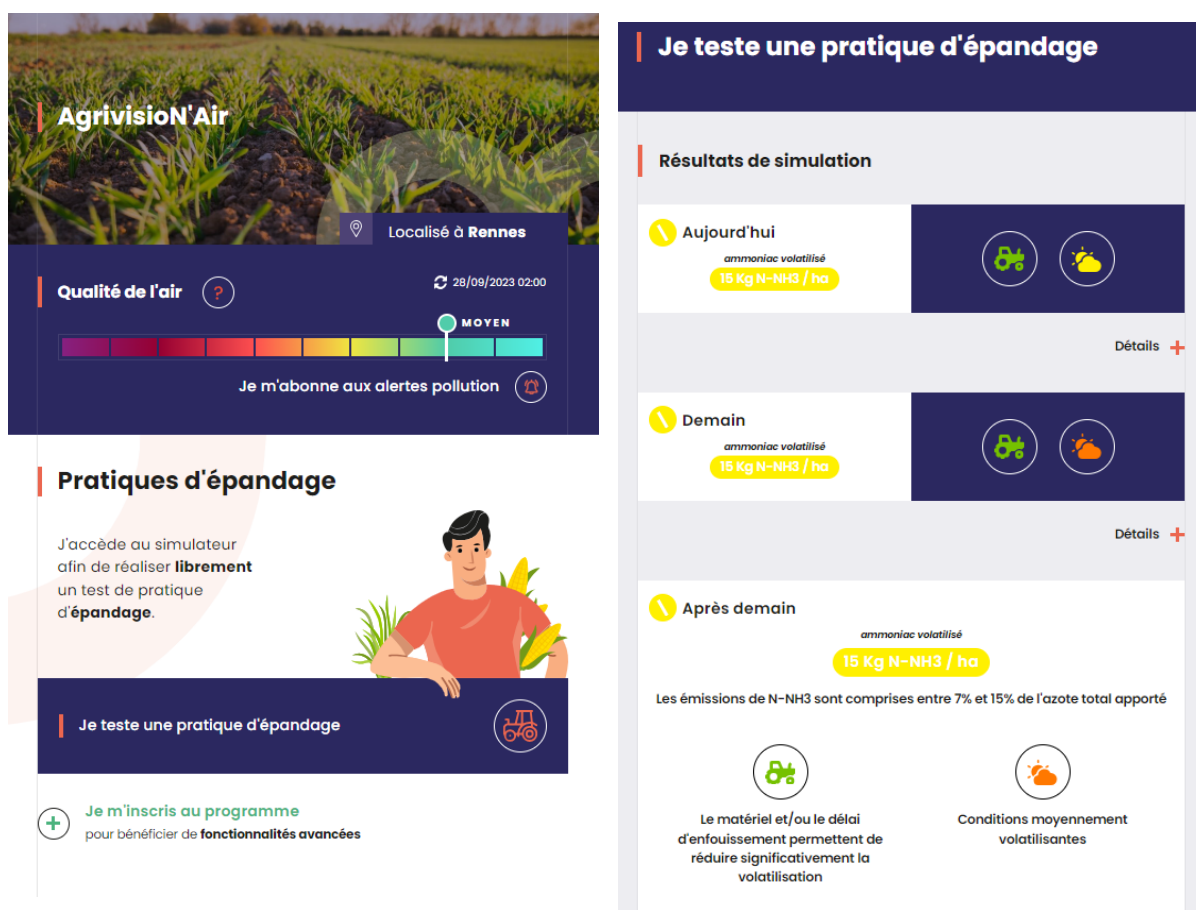


FIGURE 6.7 – Illustrations de la page d'accueil de l'application AgriVision'Air (à gauche) et d'un test de pratique d'épandage (à droite).

7 Evaluation des modélisations de l'ammoniac pour l'année de référence 2022

1 Les indicateurs statistiques

Les modèles seront analysés en les comparant aux mesures in-situ à travers les éléments statistiques suivants :

- La racine de l'erreur quadratique moyenne RMSE (Root Mean Square Error) qui permet de connaître l'écart moyen entre la prévision et la mesure. Plus la valeur est élevée, plus le modèle est éloigné de la mesure.
- Le biais moyen (Mean Bias) qui représente l'erreur moyenne du modèle.
- La corrélation (Pearson R) qui traduit la justesse du modèle dans sa reproduction de l'évolution temporelle. Une valeur proche de 1 indique une bonne performance du modèle, une valeur proche de 0 indique une incapacité à reproduire l'évolution des mesures.

Les données des modèles ont été exploitées grâce aux outils mis en place dans le cadre du projet ABAA et décrits dans le chapitre 2. Toutes les figures présentes dans cette partie ont été créées à l'aide de ces outils.

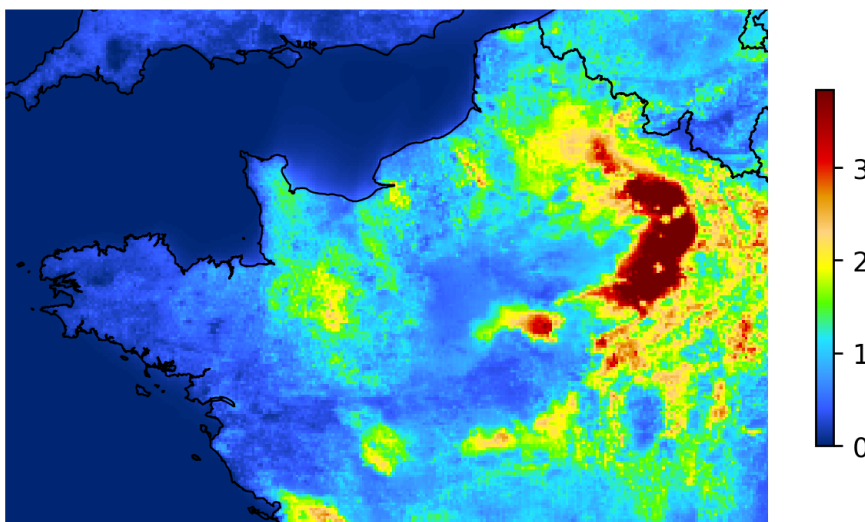


FIGURE 7.1 – Carte des concentrations moyennes en $\mu\text{g.m}^{-3}$ de NH_3 modélisées par EsmeraldaHR le 20-08-2022 et créée à l'aide de Airpy et des modèles stockés par Démétrios.

2 Les données de modélisation

Parmi les nombreuses chaînes de modélisation dont dispose Air Breizh, une partie simule la dispersion des polluants émergents tels que l'ammoniac. Les modèles suivants seront étudiés pour la période de référence 2022 :

- Esmeralda Haute Résolution et Basse Résolution (EsmeraldaHR à 3km et EsmeraldaBR à 15km), issus de la plateforme inter-régionale ESMERALDA.
- Mocage, produit par Météo-France et inclus dans le consortium européen COPERNICUS.
- Chimere, produit par l'IPSL et inclus dans le consortium européen COPERNICUS.
- Modèle "ensemble" produit par COPERNICUS à partir de 11 modèles européens.

Ces modèles sont étudiés car ils couvrent tous à minima le domaine ESMERALDA (le nord-ouest de la France) et qu'il s'agit des sources de données intégrées dans le système de prévision quotidienne de la qualité de l'air d'Air Breizh. **Remarque : la plateforme nationale PREV'AIR n'est pas incluse dans cette étude car les sorties NH_3 ne sont fournies que depuis le 14-04-2022.**

3 Les données de mesures

Afin d'analyser leurs performances respectives vis-à-vis de l'ammoniac, il est nécessaire de disposer de mesures en temps réel (pas de temps horaire) réalisées sur une période suffisante. Le dispositif de mesure de l'ammoniac étant à ses balbutiements, la couverture nationale de stations de mesures fixes est assez limitée. Les sites disponibles pour cette étude sont cependant bien répartis sur le domaine, illustrés figure 7.2, offrant ainsi une couverture spatiale intéressante.

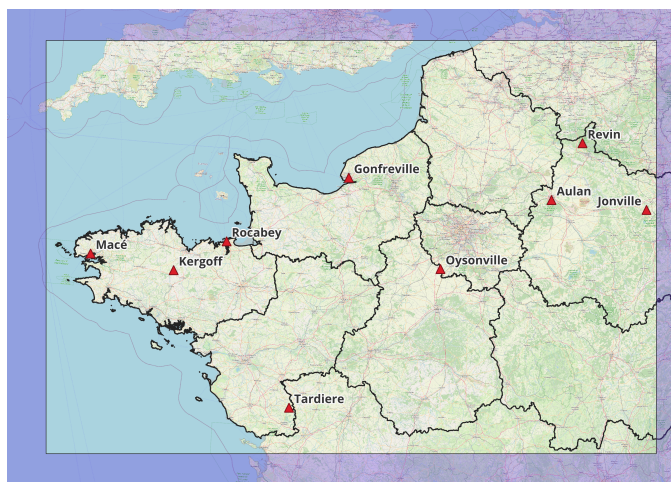


FIGURE 7.2 – Carte des régions couvertes par le domaine Esmeralda et emplacement des points de mesure NH_3 .

Dans un premier temps, les données de mesure et leur environnement (typologie) seront présentées afin de discuter de leur représentativité. Dans un second temps, les données de modélisation seront présentées et confrontées aux données de mesures sur l'année 2022 mais également sur des sous-périodes (saisons).

3.1 Présentation du jeu de données

Les données de mesure utilisées dans cette étude sont toutes issues de points de mesure exploités par une AASQA du réseau Atmo France. Ces données ont été transmises par les différents organismes ou téléchargées

sur la base de données nationale GEOD'AIR. Les points de mesures utilisés sont les suivants :

- Les stations de Macé (Brest - Urbaine de fond), Rocabey (Saint-Malo - Périurbaine de fond) et Kergoff (Merléac - Rurale nationale de fond) exploitées par Air Breizh.
- La station de la Tardière (Rurale de fond), exploitée par Air Pays de la Loire.
- La station de Gonfreville (Urbaine de fond), exploitée par Atmo Normandie.
- La station de Oysonville (Rurale de fond), exploitée par Lig'Air.
- Les stations Aulan (Reims - Urbaine de fond), Revin (Rurale de fond), Jonville (Jonville-en-Woëvre - Rurale de fond), exploitées par Atmo Grand-Est.

La table 7.1 présente une description du jeux de données de mesures.

Attention :

- Pour qu'un point de mesure puisse être exploité dans le cadre de cette évaluation, le taux de représentativité d'une donnée doit être supérieur à 75% sur une année civile (LCSQA, 2016 [9]).
- **Le déploiement de mesures in-situ d'ammoniac est récent. A l'inverse des polluants réglementaires, il n'existe pas de chaîne nationale d'étalonnage pour le NH₃. Ainsi, la justesse des données de mesure est à confirmer et leur comparaison doit être réalisée avec précaution.**

Ainsi, les stations de La Tardière et Gonfreville ne pourront pas être utilisées sur la période complète mais uniquement lors de l'analyse saisonnière. Les valeurs maximales sont mesurées sur les stations de typologie rurale, ce qui est cohérent en considérant que la source principale d'ammoniac en France est l'agriculture.

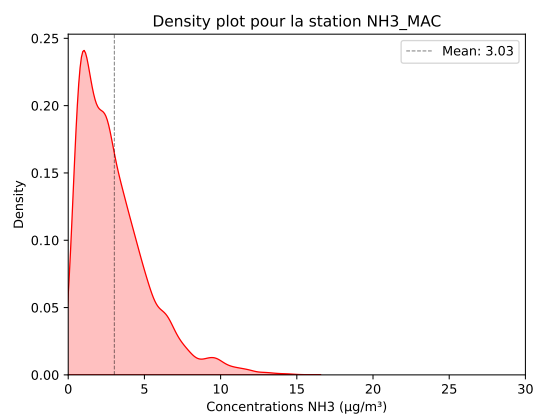
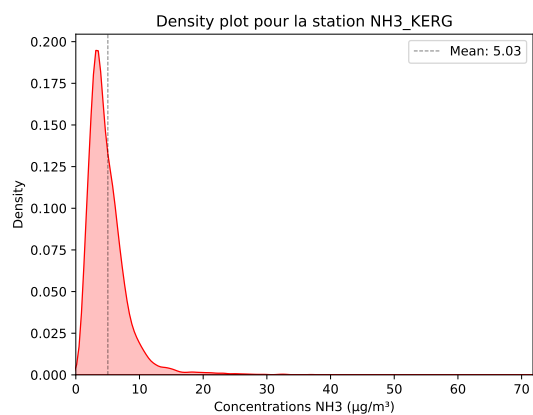
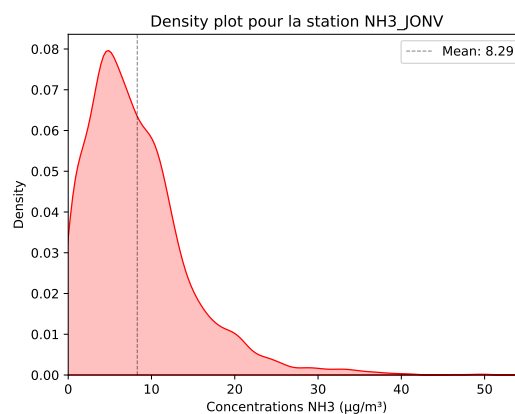
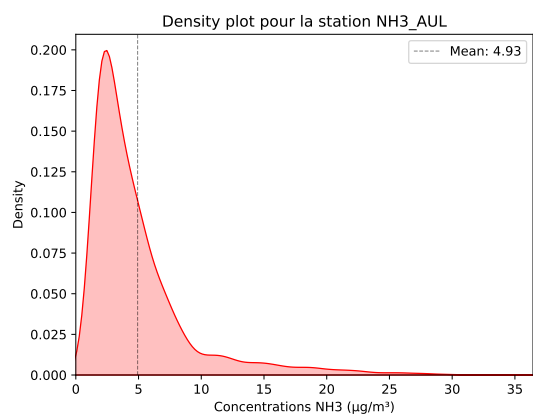
La station périurbaine de fond de Saint-Malo / Rocabey présente également des pics de concentrations élevées illustrés par les valeurs maximales et l'écart type dans la table 7.1. La campagne de suivi de l'ammoniac à Saint-Malo réalisée par Air Breizh en 2022 confirme l'influence avérée des industries malouines émettrices de NH₃ en fonction des conditions météorologiques (AirBreizh, 2023 [1]).

TABLE 7.1 – Description du jeux de données de mesures sur l'année 2022. Les valeurs sont exprimées en $\mu\text{g}.m^{-3}$

Stations	Macé	Kergoff	Rocabey	La Tardière	Gonfreville	Oysonville
Taux de représentativité	77.4%	94.6%	97.3%	72.8%	46.1%	95.9%
Valeur moyenne	3.03	5.03	6.45	5.15	4.61	3.28
Ecart type	2.31	3.68	18.83	3.12	2.04	1.93
Valeur minimale	0.00	0.44	0.26	0.63	1.10	0.50
Valeur maximale	15.39	71.79	794.05	70.03	30.70	15.80
Percentile 75	4.14	6.10	5.57	6.58	5.10	4.50
Percentile 80	4.61	6.64	6.41	7.13	5.50	4.80
Percentile 90	6.19	8.35	10.22	8.78	6.80	5.90
Percentile 95	7.55	10.47	16.72	10.40	8.10	6.80
Percentile 99	10.8	19.79	57.09	15.2	12.06	9.00

Stations	Aulan	Jonville	Revin
Taux de représentativité	95.5%	79.4%	96.7%
Valeur moyenne	4.93	8.29	2.05
Ecart Type	4.26	6.30	1.49
Valeur minimale	0.77	0.07	0.40
Valeur maximale	36.44	54.90	14.18
Percentile 75	5.81	11.13	2.70
Percentile 80	6.58	12.20	3.01
Percentile 90	9.41	16.07	4.00
Percentile 95	14.18	20.16	4.91
Percentile 99	22.50	30.98	7.48

Les figures 7.3 représentent la densité de distribution des mesures pour chaque station. Les stations avec peu d'influence industrielle ou agricole ont des distributions moins étalées. C'est également illustré par les écarts type présentés dans la table 7.1. Les concentrations mesurées dans l'air ambiant sont donc majoritairement comprises entre $0 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ et $10 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ avec des pics plus élevés pour les stations avec influence.



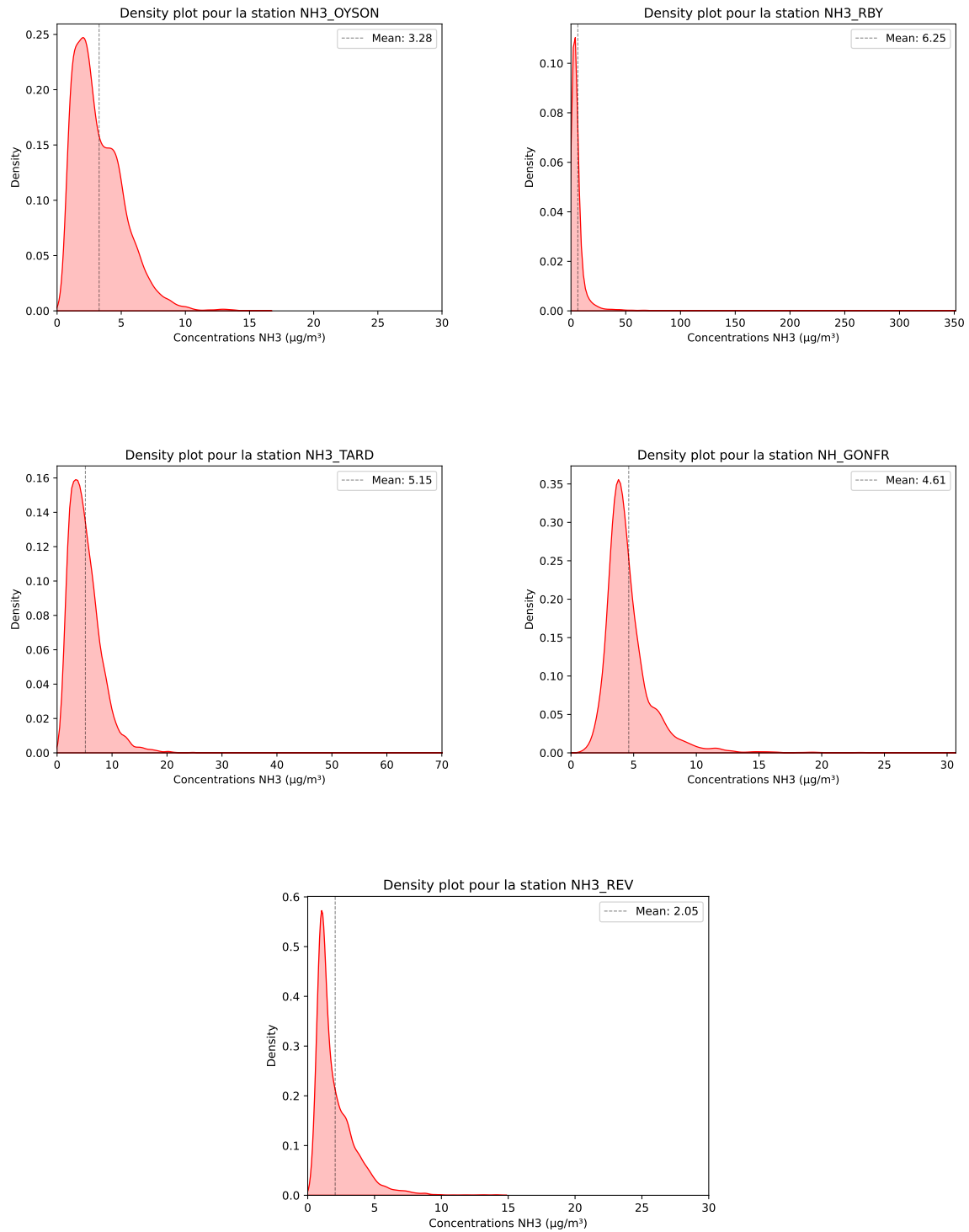


FIGURE 7.3 – Diagrammes de distribution de densité pour chaque station de mesures exploitée dans l'étude

3.2 Détermination d'un seuil d'alerte NH₃ pour l'évaluation des modélisations

Une évaluation de la performance d'un modèle est basée, entre autre, sur sa capacité à détecter un dépassement de seuil. Dans le cadre de la prévision réglementaire d'épisodes de pollution, l'analyse s'effectue à partir des seuils d'alerte préfectoraux et/ou de l'indice ATMO.

Ainsi, il peut être intéressant de définir un seuil au dessus duquel les concentrations mesurées (ou modélisées) peuvent être considérées comme exceptionnelles. Dans le cadre de l'indice ATMO et des seuils d'alerte, les seuils sont fixés dans la réglementation en fonction de leur impact sanitaire et sur la base de recommandations des instances de santé. **Il n'existe pas de réglementation pour le NH₃ dans l'air ambiant.**

La table 7.2 présente les percentiles 90, 95 et 99 pour chaque station et la moyenne de ces derniers.

Compte tenu :

- De l'influence trop importante de stations perturbées par des activités locales sur la moyenne du percentile 99 (exemple : Rocabey).
- Des faibles valeurs des percentiles 90.4, correspondant au nombre de jours maximum de dépassements autorisés par an du seuil d'information et de recommandations / seuil d'indice ATMO "mauvais" pour les particules fines PM10.

Le seuil retenu arrondi à l'unité est de 10 $\mu\text{g}.m^{-3}$. Il sera utilisé pour déterminer si les modèles sont capables de détecter un dépassement. Le percentile 99 sera utilisé pour illustrer certaines analyses. Ce seuil sera également utilisé pour l'analyse sur les données de 2023.

TABLE 7.2 – Table récapitulatif des percentiles 90, 95 et 99 pour chaque station et la moyenne.

Stations	Typologie	percentile 90	percentile 95	percentile 99
Macé	Urbaine de fond	6.19	7.55	10.8
Kergoff	Rurale de fond	8.35	10.47	19.79
Rocabey	Périurbaine	10.22	16.72	57.09
La Tardière	Rurale	8.78	10.40	15.2
Gonfreville	Urbaine de fond	6.80	8.10	12.06
Oysonville	Rurale de fond	5.90	6.80	9.00
Aulan	Urbaine de fond	9.41	14.18	22.50
Jonville	Rurale de fond	16.07	20.16	30.98
Revin	Rurale de fond	4.00	4.91	7.48
Moyenne	-	8.4	11.03	20.54

4 Présentation des résultats

4.1 Scores simples

Les figures 7.4 représentent, sous forme d'histogramme, la corrélation, le biais moyen et la RMSE pour les modèles étudiés à J+0. Tous les modèles ont tendance à sous-estimer les concentrations de NH_3 , Mocage étant le modèle avec le biais le plus faible. Les RMSE sont très proches entre les modèles. Pour ce qui est des corrélations, tous les modèles ont des résultats assez faibles avec une corrélation proche de 0.4. Le modèle "ensemble" de COPERNICUS présente la meilleure corrélation avec une valeur de 0.5. Le détail des scores est présenté dans la table 7.3.

S'il n'existe pas de seuil réglementaire à atteindre en terme de modélisation pour le NH_3 , le seuil de corrélation le plus bas parmi les polluants réglementaires est celui du NO_2 avec un objectif fixé à 0.6.

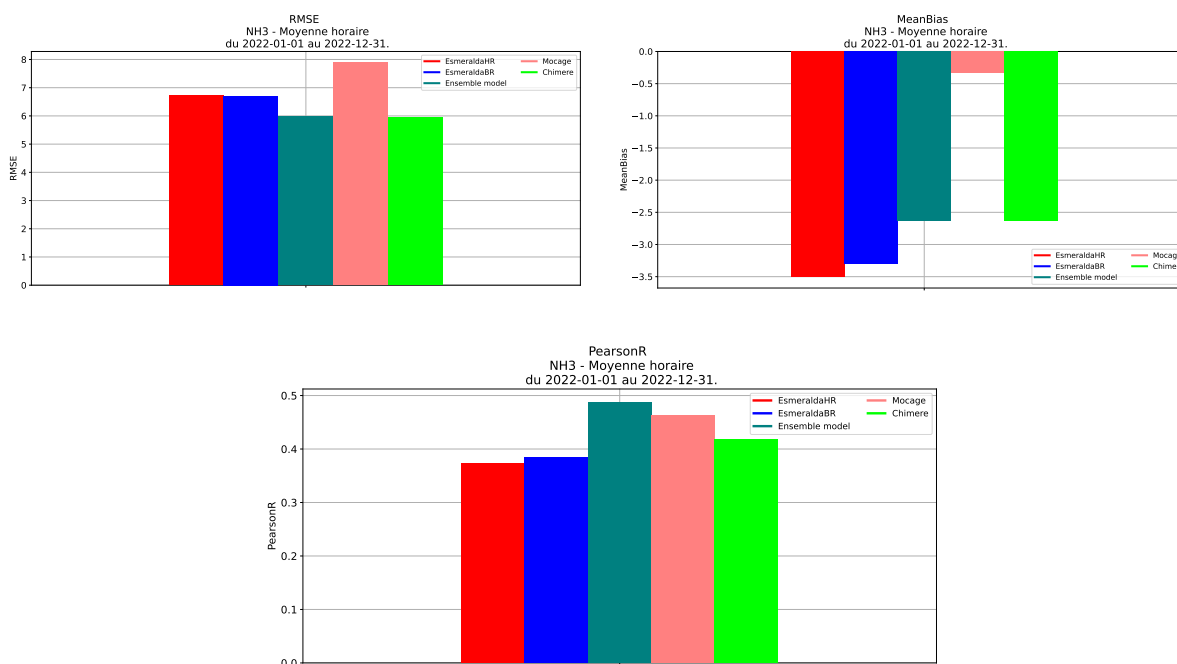


FIGURE 7.4 – RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)

TABLE 7.3 – Scores pour le NH_3 à J+0

	EsmeraldaHR	EsmeraldaBR	Ensemble model	Mocage	Chimere
RMSE	6.72	6.70	5.99	7.89	5.95
MeanBias	-3.50	-3.31	-2.63	-0.33	-2.63
PearsonR	0.37	0.39	0.49	0.46	0.42

Scores par gamme de concentration et détection de dépassement

Les figures 7.5 représentent, sous forme d'histogramme, le biais moyen et la RMSE pour différentes gammes de concentration. Le même comportement est observé pour tous les modèles avec une dégradation des résultats lorsque les concentrations augmentent. Cela illustre la difficulté inhérente à modéliser les pics exceptionnels, ce qui est d'autant plus vrai dans le cadre du NH_3 .

Mocage présente cependant un biais moyen bien plus faible que les autres modèles et notamment pour les concentrations faibles. Le biais est également plus faible pour les concentrations importantes ($>20 \mu\text{g.m}^{-3}$ correspondant au percentile 99 du jeu de données de mesures).

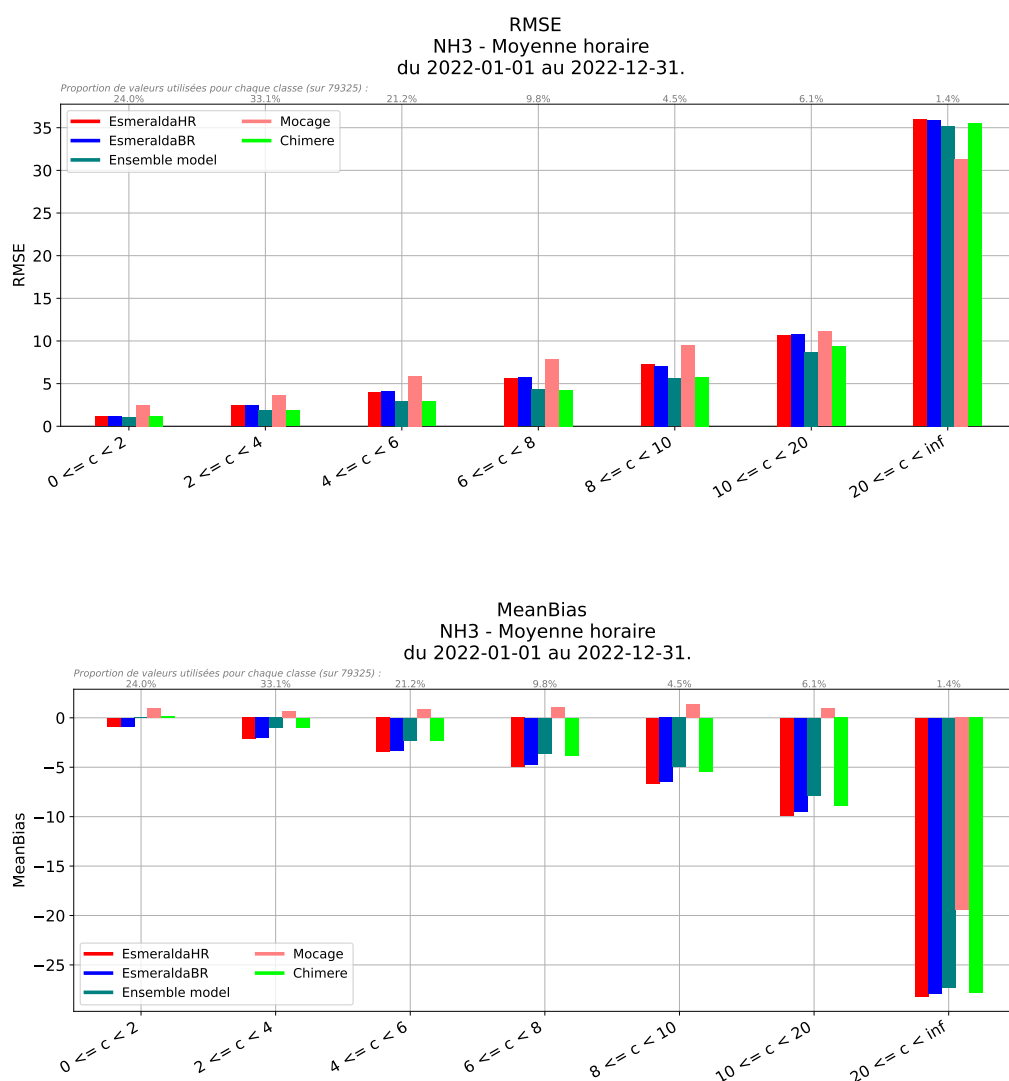


FIGURE 7.5 – RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélations (en bas) pour différentes gammes de concentration.

Les figures 7.6 et 7.7 représentent, sous forme d'histogramme, le nombre de bonnes détections, fausses détections et détections manquées du seuil de $10 \mu\text{g}.\text{m}^{-3}$ de NH_3 fixé dans la partie 3.2. Les figures 7.5 montrent que les modèles sous-estiment fortement les concentrations supérieures à $20 \mu\text{g}.\text{m}^{-3}$. Aussi, les performances de détection des dépassements du seuil sont mauvaises pour tous les modèles. EsmeraldaHR, EmseraldaBR, Ensemble et Chimere réalisent un nombre très faible de bonnes détections et quelques fausses détections. Mocage réalise plus de bonnes détections mais également un nombre très important de fausses détections probablement en lien avec son biais positif pour les gammes de concentration inférieures à $20 \mu\text{g}.\text{m}^{-3}$.

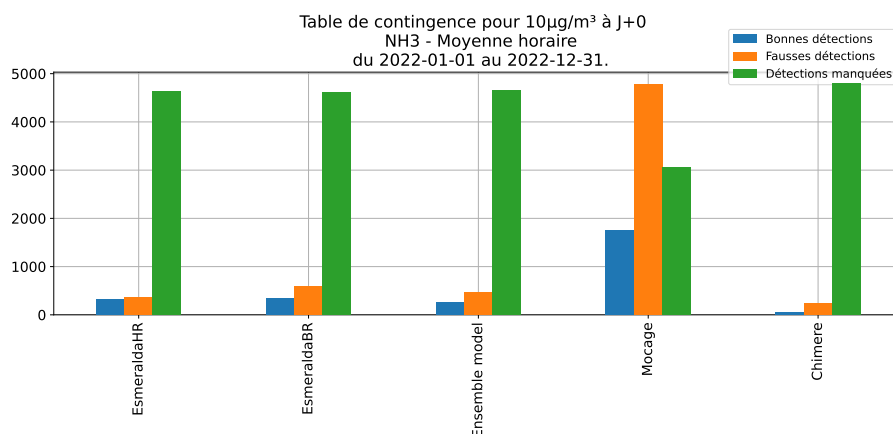


FIGURE 7.6 – Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+0.

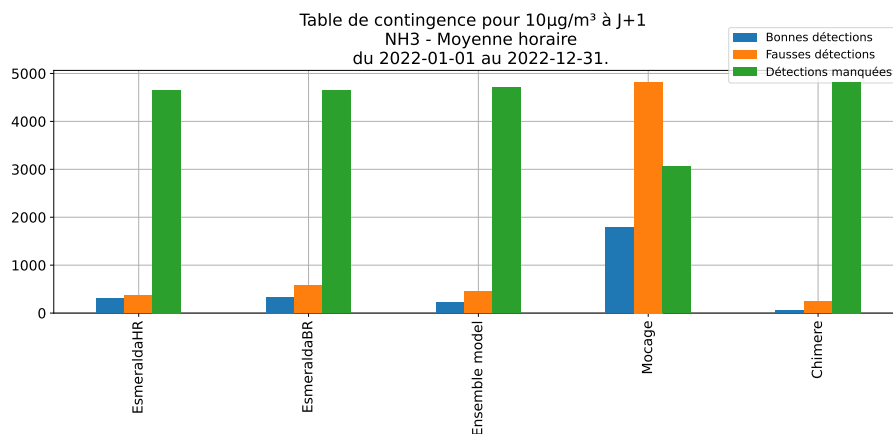


FIGURE 7.7 – Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+1.

Scores par typologie

La figure 7.8 représente, sous forme d'histogramme, la RMSE, le biais moyen et la corrélation pour les différentes typologies de stations disponibles dans l'échantillon de mesures (Urbaine, Rurale, Périurbaine). Les modélisations produisent toutes de meilleurs résultats pour les stations urbaines avec des corrélations autour de 0.6, des RMSE inférieurs à 5 et des biais moyens autour de $-2.5 \mu g.m^{-3}$. Les résultats se dégradent ensuite pour les stations rurales avec des corrélations autour de 0.4 ainsi qu'une RMSE et un biais moyen en hausse. Enfin, les résultats se dégradent fortement pour la seule station périurbaine du jeu de données (Saint Malo - Rocabey) avec une corrélation inférieure à 0.2, une RMSE proche de 20 et un biais moyen dépassant les $-5 \mu g.m^{-3}$ en lien avec l'influence des industries malouines.

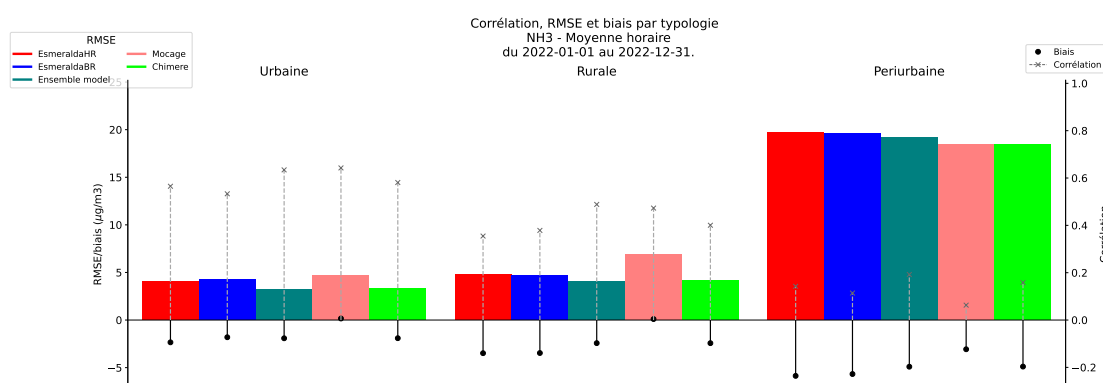


FIGURE 7.8 – RMSE, biais moyen et corrélation par typologie de stations.

4.2 Scores par région

Dans cette partie, les scores par région seront présentés pour mettre en évidence d'éventuelles différences régionales dans la qualité des modélisations.

La figure 7.9 présente, sous forme d'histogramme, la RMSE, le biais moyen et la corrélation pour les régions du domaine ayant des stations de mesures. La Normandie et les Pays de la Loire ne sont pas représentées car leur sites n'ont pas un taux de représentativité supérieur à 75% sur l'année de référence 2022.

Pour la région Centre-Val de Loire, une seule station (rurale) est disponible, les résultats sont donc à considérer en conséquence. Le biais moyen est compris entre -2 et $2 \mu g.m^{-3}$. A l'exception du modèle Mocage, la RMSE est la plus faible dans cette région. La corrélation est la plus faible avec un score compris entre 0.3 et 0.4 pour tous les modèles sauf Mocage qui s'approche des 0.5.

Les régions Bretagne et Grand-Est présentent des résultats similaires. La corrélation est légèrement meilleure pour la région Grand-Est avec un score compris entre 0.5 et 0.6 pour les modèles Ensemble et Mocage. Les scores de biais moyen et de RMSE sont également dégradés pour la région Bretagne.

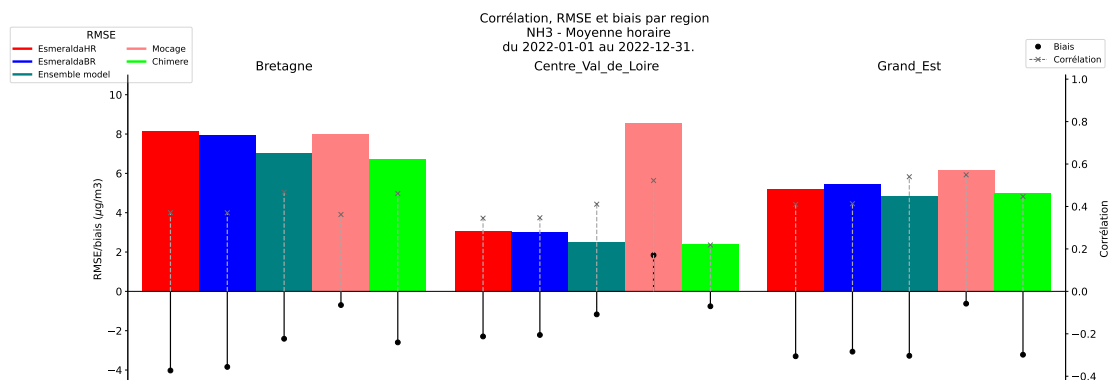


FIGURE 7.9 – RMSE, Biais moyen et corrélation pour les régions du domaine possédant de la donnée de mesure sur la totalité de la période étudiée.

La figure 7.10 présente les mêmes scores mais en excluant la station Rocabey pour la région Bretagne. En effet, la partie 4.1 montre que les modèles peinent à reproduire la situation à cette station en raison d'une influence locale. En enlevant cette station, les scores de la région Bretagne s'améliorent avec une corrélation comprise entre 0.4 et 0.6 et une réduction du biais moyen et de la RMSE pour tous les modèles.

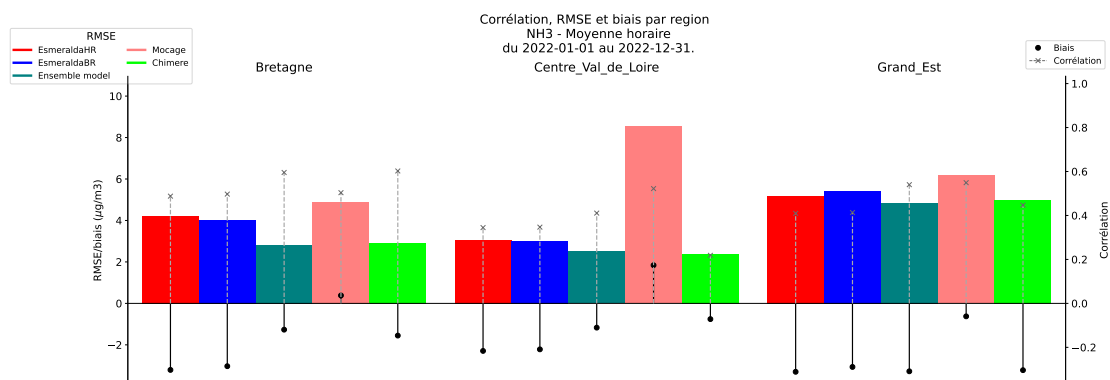


FIGURE 7.10 – RMSE, Biais moyen et corrélation pour les régions du domaine possédant de la donnée de mesure sur la totalité de la période étudiée à l'exception de la station Rocabey en Bretagne.

4.3 Présentation des scores par saison

Dans cette partie, les données seront étudiées par périodes saisonnières, c'est à dire pour la période hivernale (du 1^{er} janvier au 1^{er} mars), printanière (du 1^{er} mars au 1^{er} juin), estival (du 1^{er} juin au 1^{er} septembre) et automnale (du 1^{er} septembre au 1^{er} décembre).

Les figures 7.11 représentent le biais moyen sous forme d'histogramme. Ces figures montrent que les modèles sous estiment les concentration de NH₃ quelque soit la saison, en particulier les modèles d'ESMERALDA. Mocage est une exception car ce modèle sur-estime les concentrations en hiver et au printemps.

Le biais est maximal au printemps, période d'activité agricole importante.

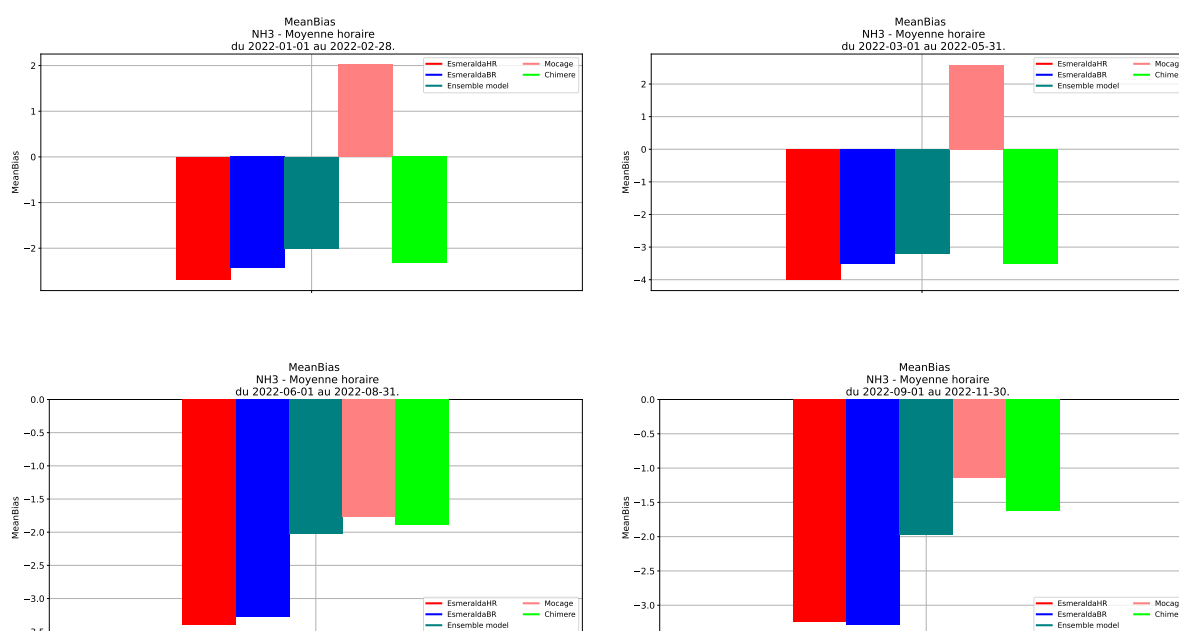


FIGURE 7.11 – Biais moyen pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).

Les figures 7.12 représentent la RMSE sous forme d'histogramme. Comme pour le biais, les périodes avec activité agricole (printemps et été) présentent les RMSE les plus importantes. Le modèle Mocage se distingue au printemps et en hiver avec une RMSE plus élevée que pour les autres modèles.

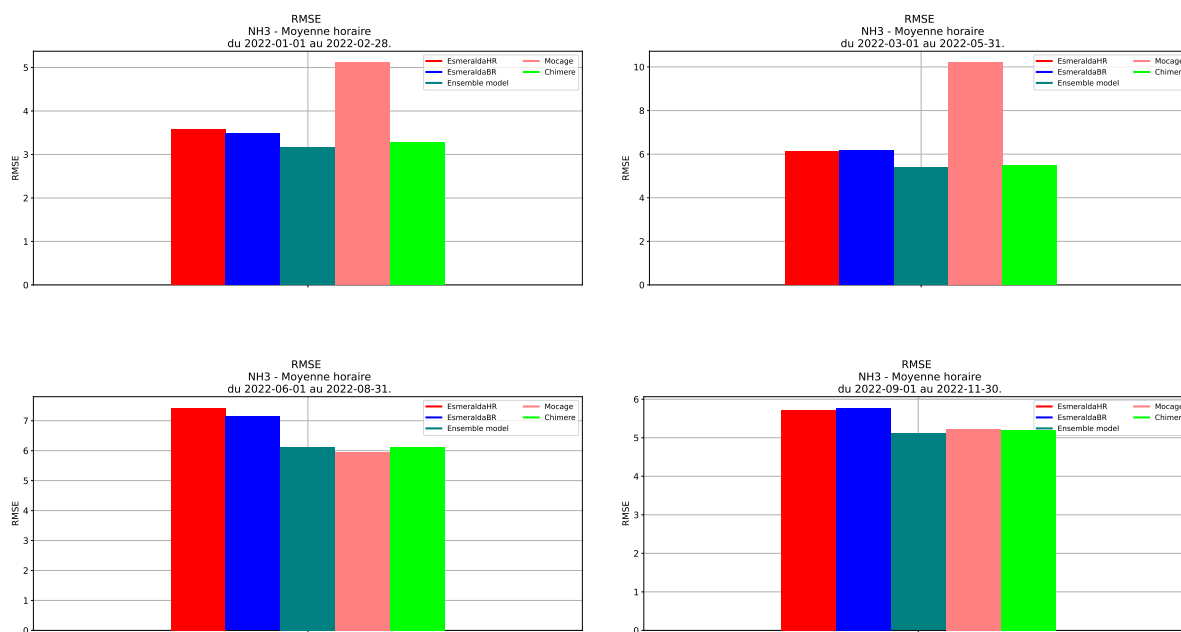


FIGURE 7.12 – RMSE pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).

Les figures 7.13 représentent la corrélation sous forme d'histogramme. Les modèles COPERNICUS (Ensemble, Mocage et Chimere) se distinguent au printemps avec des corrélations atteignant 0,4, contrairement aux modèles d'ESMERALDA qui peinent à reproduire les variations horaires mesurées.

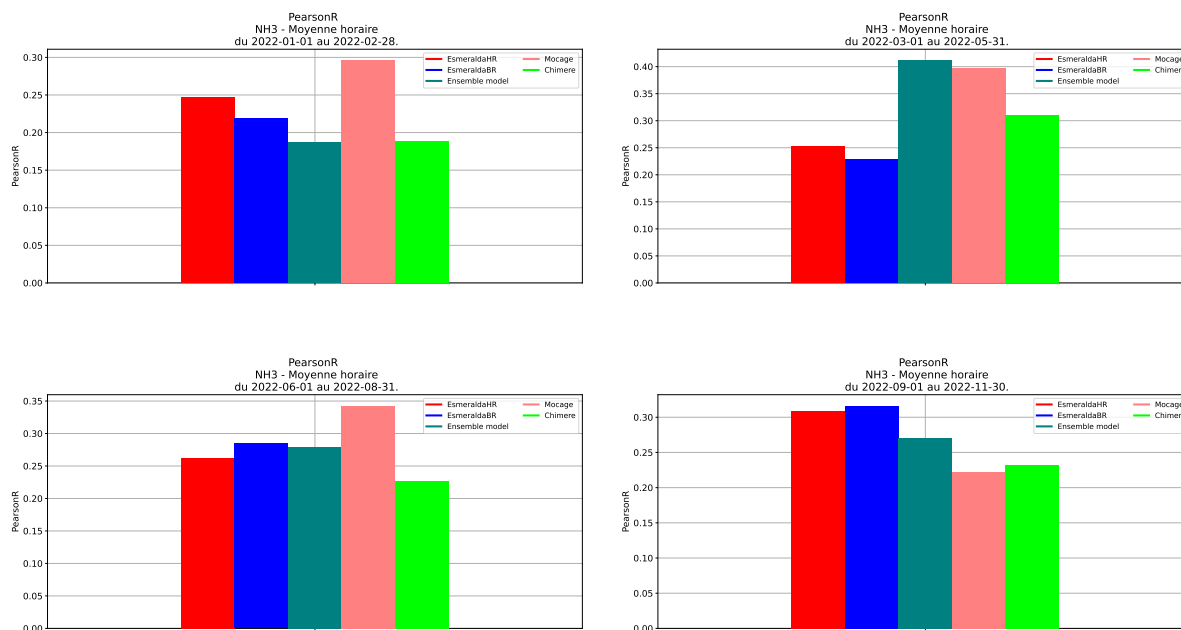


FIGURE 7.13 – Corrélations pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).

8 Evaluation des modélisations de l'ammoniac pour la Bretagne sur la période printemps/été 2023

Dans cette partie, les performances des modèles sont évaluées sur la région Bretagne uniquement afin d'analyser les performances du modèle PrevairHR produit par l'INERIS (mis à disposition sur la Bretagne uniquement). Également, la période d'étude est réduite au printemps et à l'été (du 01-03-2023 au 30-09-2023) afin de maximiser la quantité de données disponibles, mais également d'analyser les performances sur une période d'activité agricole importante.

1 Les données de mesure

Les données de mesures utilisées dans cette partie sont celles issues du réseau de surveillance d'Air Breizh. Les stations Macé (Brest) et Kergoff (Merléac) font partie du réseau de surveillance permanent de l'association. Le site Nord est l'une des trois stations de mesure qui ont été mises en place dans le cadre du projet ABAA sur la zone pilote.

La table 8.1 et les figures 8.1 et 8.2 présentent un résumé statistique des concentrations relevées aux stations de mesure disponibles sur la période étudiée. Elles présentent de caractéristiques différentes :

- La station urbaine de fond Macé relève les concentrations les plus faibles du jeu de données disponibles, avec un écart type réduit (distribution resserrée), peu de valeurs hautes (percentile 90 = $5.1 \mu\text{g}.m^{-3}$, soit 90 % des moyennes horaires inférieures ou égales à $5 \mu\text{g}.m^{-3}$) et une moyenne sur la période de $2.8 \mu\text{g}.m^{-3}$;
- À l'inverse, le site Nord, station rurale de proximité agricole, relève les concentrations les plus élevées avec une distribution plus étalée (fort écart type), 10 % des moyennes horaires supérieures ou égales à $19 \mu\text{g}.m^{-3}$) et une moyenne sur la période de $8.6 \mu\text{g}.m^{-3}$;
- La station de référence Kergoff, rurale nationale de fond, relève un comportement intermédiaire avec une moyenne sur la période de $4.4 \mu\text{g}.m^{-3}$.

TABLE 8.1 – Statistiques sur les données d'observations

	Site Nord	Kergoff	Macé
Taux de représentativité	92.25	92.02	90.67
Valeur moyenne	8.61	4.42	2.78
Ecart type	7.98	2.71	1.79
Valeur minimale	0.84	0.79	0.34
Valeur maximale	70.97	20.1	17.02
Percentile 75	11.76	5.62	3.81
Percentile 80	13.66	6.31	4.18
Percentile 90	19.26	8.08	5.07
Percentile 95	25.2	9.87	6.08
Percentile 99	37.43	13.5	8.47

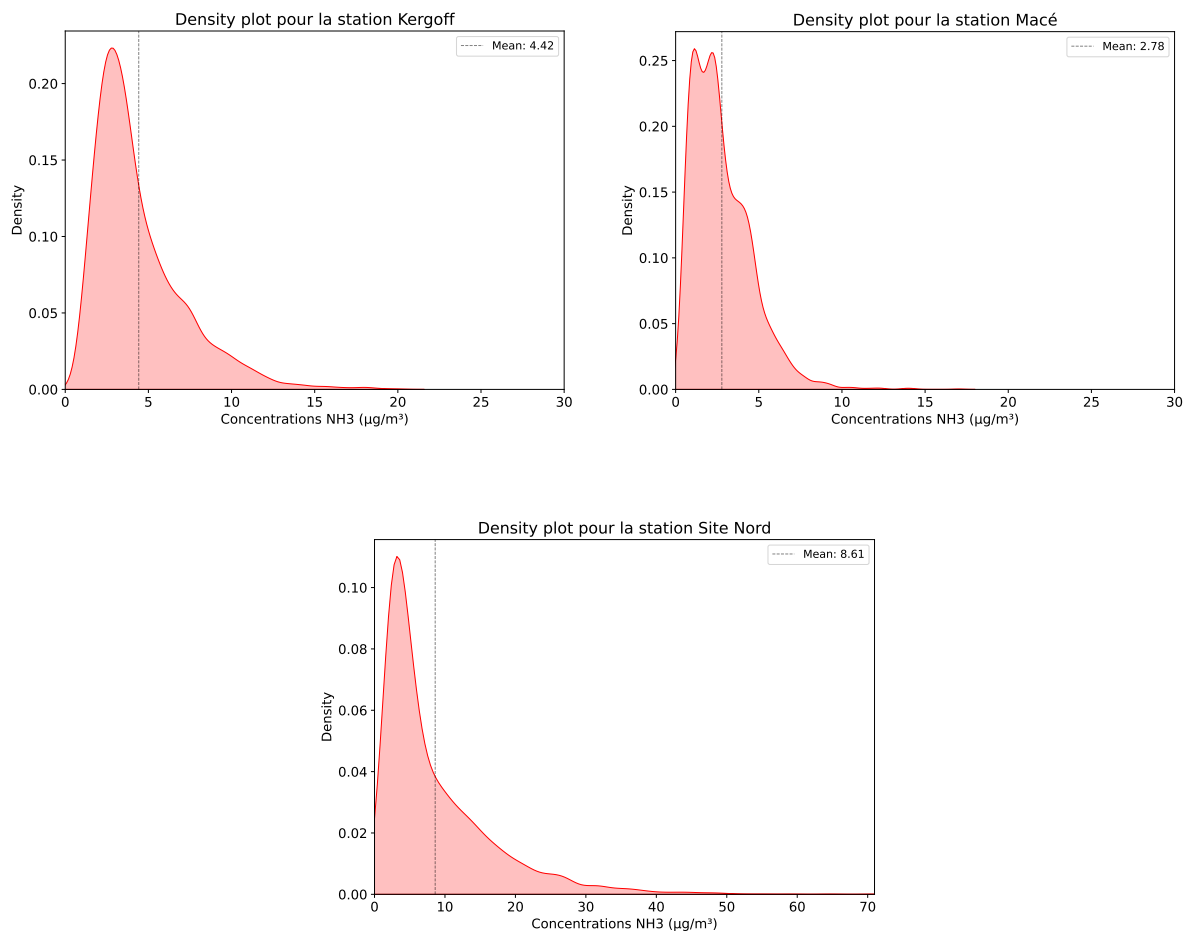


FIGURE 8.1 – Diagrammes de distribution de densité pour chaque station de mesures exploitée dans l'étude

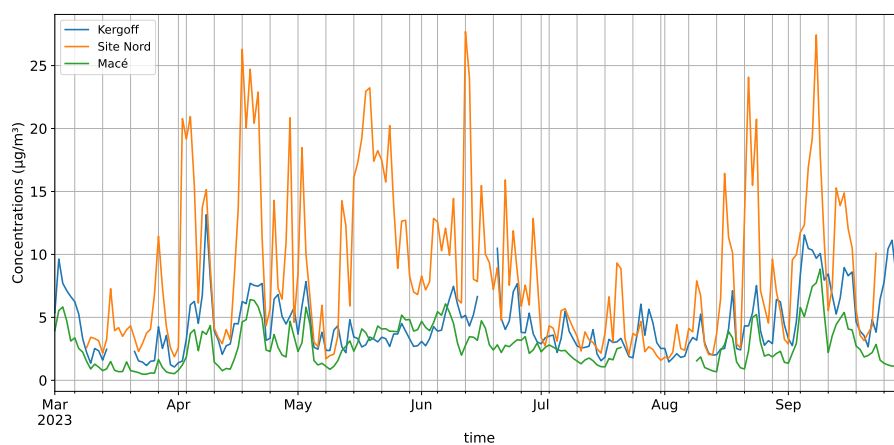


FIGURE 8.2 – Concentrations moyennes journalières de NH₃ aux stations de mesure - Bretagne

2 Présentation des résultats

2.1 Scores simples

Les figures 8.3 représentent, sous forme d'histogramme, la corrélation, le biais moyen et la RMSE pour les modèles étudiés à J+0. Tous les modèles ont tendance à sous-estimer les concentrations de NH₃. Le biais moyen et la RMSE des modèles Ensemble, PrevairHR, Chimere et Mocage sont similaires et sont également les plus faibles. Leur corrélation est proche également, mais les modèles Ensemble et PrevairHR se distinguent avec une corrélation supérieure à 0.5, suivis de Chimere et Mocage. Les performances de EsmeraldaHR et BR sont proches sur les trois indicateurs étudiés.

Le détail des scores est présenté dans la table 8.2.

S'il n'existe pas de seuil règlementaire à atteindre en termes de modélisation pour le NH₃, le seuil de corrélation le plus bas parmi les polluants règlementaires est celui du NO₂ avec un objectif fixé à 0.6.

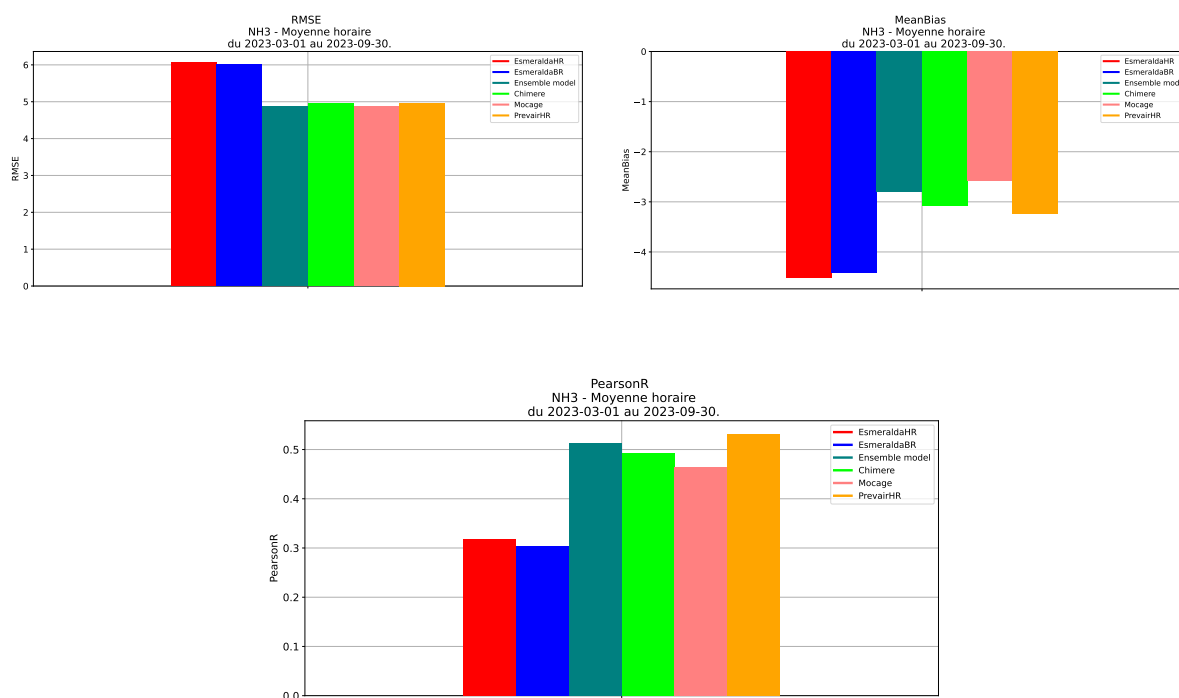


FIGURE 8.3 – RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)

TABLE 8.2 – Scores pour NH₃ à J+0

	EsmeraldaHR	EsmeraldaBR	Ensemble model	Chimere	Mocage	PrevairHR
RMSE	6.06	6.01	4.88	4.95	4.88	4.97
MeanBias	-4.51	-4.41	-2.81	-3.09	-2.58	-3.24
PearsonR	0.32	0.30	0.51	0.49	0.46	0.53

2.2 Scores par gamme de concentration et détection de dépassement

Les figures 8.4 représentent, sous forme d'histogramme, le biais moyen et la RMSE pour différentes gammes de concentration. Tous les modèles sous-estiment les concentrations, de plus les résultats se dégradent avec l'augmentation des concentrations. Pour les deux indicateurs étudiés par gamme de concentration, les performances des modèles Ensemble, Mocage, Chimere et PrevairHR sont équivalentes. De la même manière, les performances de EsmeraldaHR et BR sont équivalentes.

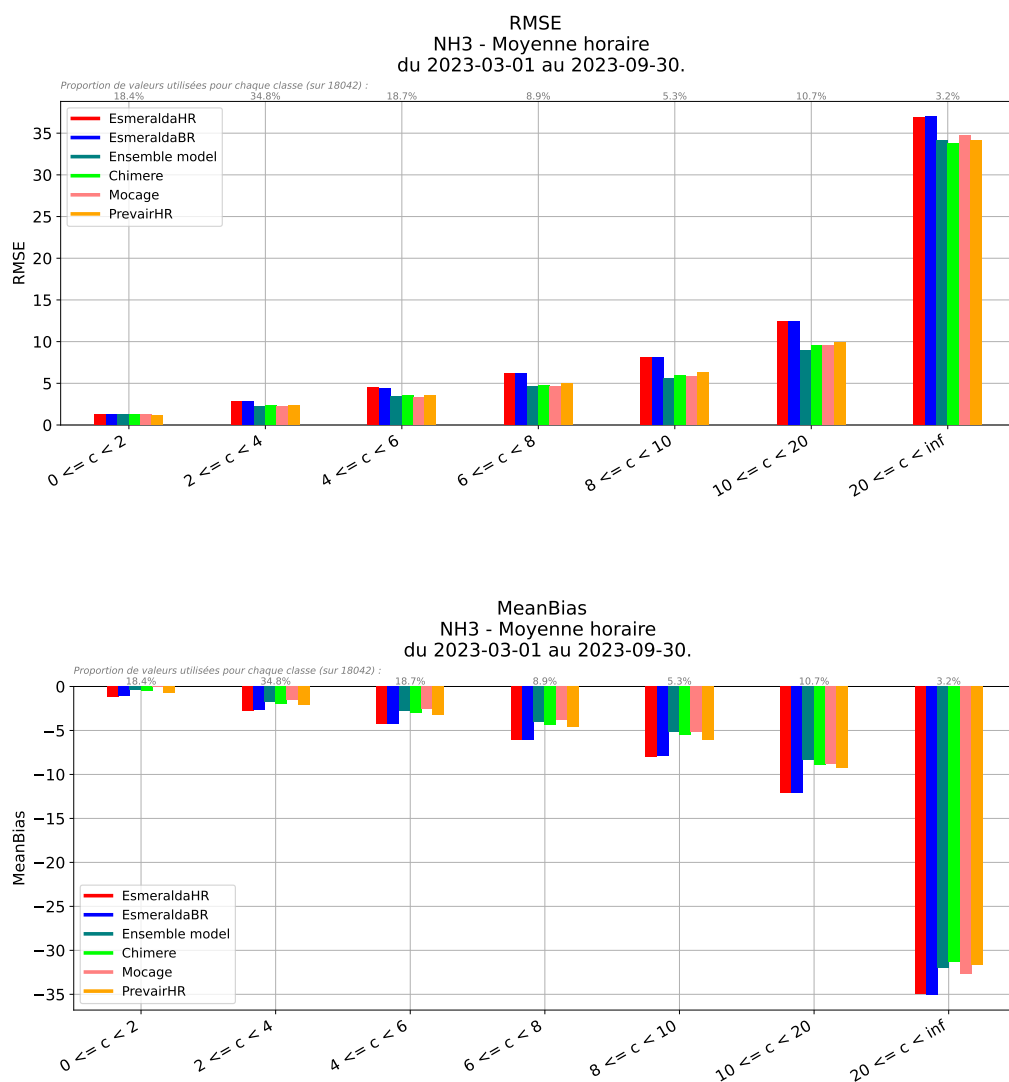


FIGURE 8.4 – RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélation (en bas) pour différentes gammes de concentration.

Les figures 8.5 et 8.6 représentent, sous forme d'histogramme, le nombre de bonnes détections, fausses détections et détections manquées du seuil de $10 \mu\text{g}.\text{m}^{-3}$ de NH_3 fixé dans la partie 3.2. La forte sous-estimation des concentrations cause un très faible taux de détection des dépassements pour l'ensemble des modèles. EsmeraldaHR, Ensemble, Chimere, Mocage et PrevairHR réussissent tout de même à effectuer un faible nombre de bonnes détections et font également un faible nombre de fausses détections.

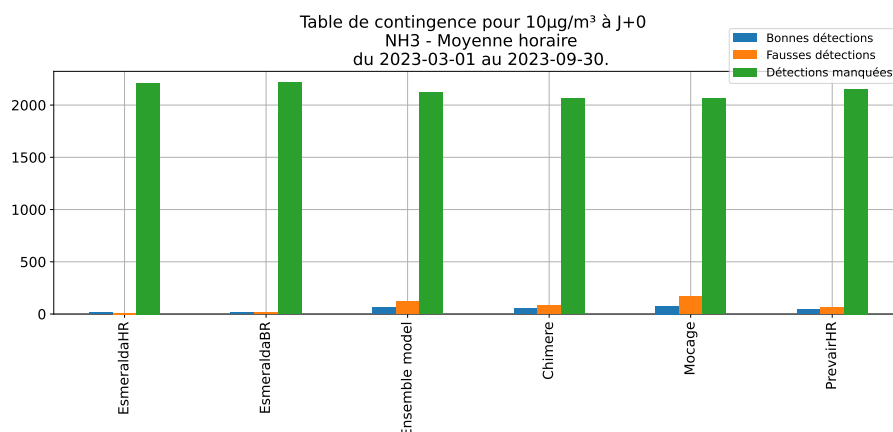


FIGURE 8.5 – Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+0.

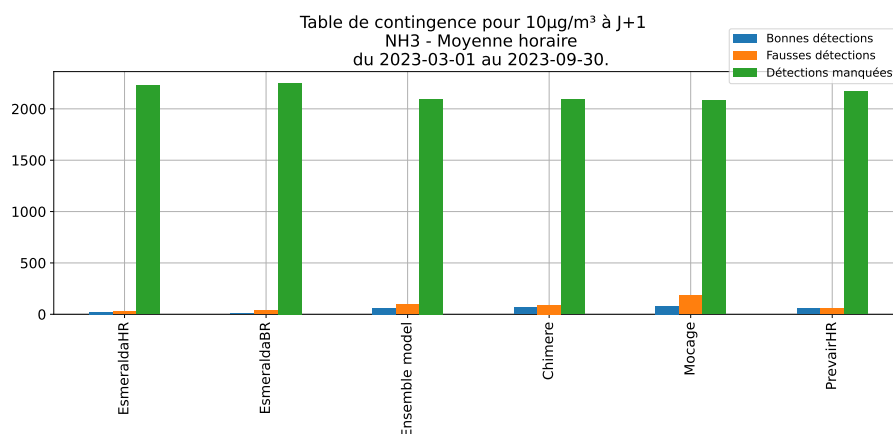


FIGURE 8.6 – Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+1.

2.3 Scores par typologie

La figure 8.7 représente, sous forme d'histogramme, la RMSE, le biais moyen et la corrélation pour les différentes typologies de stations disponibles dans l'échantillon de mesures (Urbaine, Rurale, Périurbaine). L'échantillon de données ne contenant pas de station périurbaine, aucun score n'est disponible pour cette typologie. Les performances relatives des modèles sont identiques aux scores simples et par gamme de concentration avec les modèles Ensemble, Chimere, Mocage et PrevairHR, légèrement plus performants qu'EsmeraldaHR et BR. Cependant, une différence est observée entre les scores en situation Urbaine et Rurale. En effet, les scores se dégradent en situation Rurale (proche des sources) avec un biais moyen et une RMSE importants et une corrélation légèrement plus faible qu'en situation Urbaine.

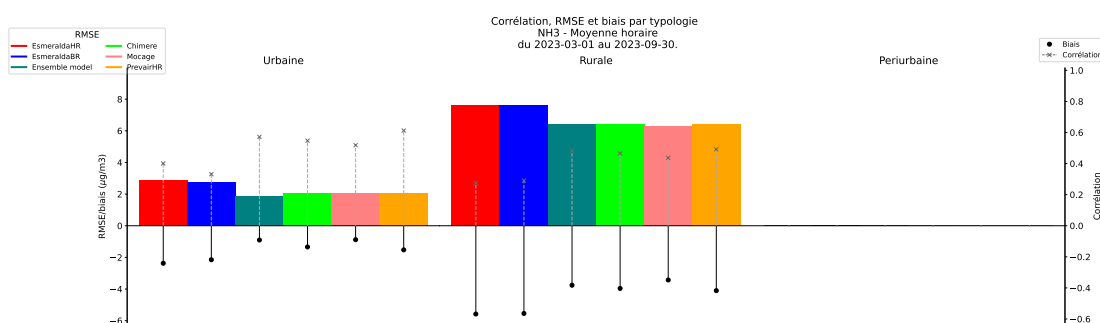


FIGURE 8.7 – RMSE, biais moyen et corrélation par typologie de stations.

2.4 Scores par échéance

La figure 8.8 représente les scores sur un seul graphique pour J+0, J+1 et J+2. Les performances des modèles sont stables entre les échéances, à l'exception de EsmeraldaHR à J+2 qui voit sa RMSE augmenter et sa corrélation diminuer.

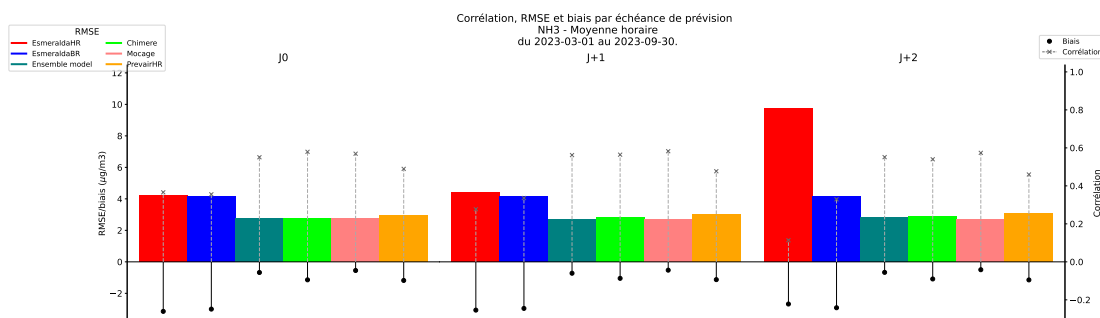


FIGURE 8.8 – RMSE, biais moyen et corrélation pour J+0, J+1 et J+2.

9 Conclusion de l'évaluation des modélisations de l'ammoniac

Les performances d'une sélection de modèles simulant la dispersion de l'ammoniac (NH_3) ont été étudiées. Les données modélisées ont été confrontées aux données de mesures récoltées par les AASQA du réseau ATMO France. Les scores de RMSE, de biais moyen et de corrélation ont été analysés pour l'année 2022 et la période printemps/été 2023, par typologie, par région et enfin par saison. La capacité des modèles à détecter des dépassements de seuil a également été explorée.

Attentions particulières :

- Le déploiement de mesures in-situ d'ammoniac en est à ses balbutiements. A l'inverse des polluants réglementaires, il n'existe pas de chaîne nationale d'étalonnage pour le NH_3 . Ainsi, la justesse des données de mesure est à confirmer et leur comparaison doit être réalisée avec précaution.
- Une évaluation de la performance d'un modèle est basée, entre autre, sur sa capacité à détecter un dépassement de seuil. Dans le cadre de la prévision réglementaire d'épisodes de pollution, l'analyse s'effectue à partir des seuils d'alerte préfectoraux et/ou de l'indice ATMO. Ceux-ci sont fixés dans la réglementation en fonction de leur impact sanitaire et sur la base de recommandations des instances de santé. Aucune réglementation n'existe pour le NH_3 dans l'air ambiant. Un seuil a donc été élaboré dans le cadre de cette étude à partir des mesures d'ammoniac in-situ.

L'étude globale met en évidence une sous-estimation des concentrations d'ammoniac de tous les modèles.

- L'étude des scores par gamme de concentration des parties 7.4.1 et 8.2.2 montre que cette sous-estimation s'accroît avec l'augmentation des concentrations. Les modèles ont donc de grandes difficultés à prévoir des dépassements de seuil.
- L'étude par typologie de station de la partie 7.4.1 et 8.2.3 met en évidence des différences notables. Les performances des modèles en zone urbaine sont meilleures qu'en zone rurale, laissant penser que les sources d'ammoniac sont mieux connues et implémentées (quantité et temporalité) dans les modélisations en situation urbaine (trafic, éventuelles industries) qu'en situation rurale (agriculture).
- L'étude par saison de la partie 7.4.3 ainsi que l'étude sur la période estivale 2023 du chapitre 8 vont également dans ce sens en mettant en évidence des différences, la sous-estimation des concentrations étant plus importante lors des périodes de forte activité agricole (printemps et été).

Aucun objectif de qualité n'existe pour la modélisation du NH_3 , contrairement aux polluants réglementés (NO_2 , PM_{10} , $\text{PM}_{2.5}$ et O_3). Cependant, en considérant les objectifs de qualité du NO_2 (un polluant gazeux réactif et dont l'impact direct est local comme le NH_3), les scores présentés sont insuffisants.

Le cas particulier de la station périurbaine de fond de Saint-Malo (Rocabey) apparaît lors de cette analyse de performances. L'influence avérée des industries malouines émettrices de NH_3 (AirBreizh, 2023 [1]) n'étant pas prise en compte dans les modélisations, les performances de celles-ci sont fortement dégradées comme le montrent les scores par région de la partie 7.4.2.

L'amélioration des connaissances des pratiques agricoles, par le biais d'outils tels qu'AgriVision'air, sera un des leviers d'amélioration de l'inventaire des émissions et de la modélisation régionale de l'ammoniac et des particules fines (estimation des quantités d'émission et leur temporalité).

1 Analyse par composante pour le redéploiement des stations de mesures.

1.1 Objectif

Le projet AABA a permis à Air Breizh d'acquérir un réseau de mesure d'ammoniac conséquent. À la fin du projet, ces stations seront redistribuées hors du territoire pilote afin d'étendre la surveillance du NH_3 à l'ensemble de la Bretagne. Ces mesures pourront être utilisées pour les activités de l'association.

Afin d'aider au choix de la zone d'implantation des stations, les données de modélisation d'EsmeraldaHR (le modèle produit par AirParif) et le modèle Ensemble (le modèle le plus performant parmi les modèles étudiés dans les chapitres 7 et 8) seront analysés au travers d'une analyse en composantes principales (ACP).

Une analyse statistique des données de modélisation par composante principale permet d'identifier des mailles des modèles variant de manière similaire et ainsi de mettre en avant de potentielles zones d'intérêt pour l'implantation des sites de mesure. L'ajout de mesures dans ces zones permettront d'améliorer l'analyse des modèles et leurs performances.

Les modèles ont été analysés sur la période de référence 2023 avec une recherche de cinq composantes principales afin de déterminer 5 zones d'intérêt pour implanter des stations de mesure.

1.2 Analyse de EsmeraldaHR

L'analyse par composante d'EsmeraldaHR illustrée dans les figures 9.1 met en évidence 5 zones d'intérêt :

- Le centre Bretagne, où est implantée la station de fond rurale Kergoff, lieu-dit de la commune de Merléac,
- L'est de l'Ille-et-Vilaine, proche de Rennes,
- L'ouest du Finistère,
- La côte nord de la Bretagne,
- Le sud-ouest de l'Ille-et-Vilaine et l'est du Morbihan.

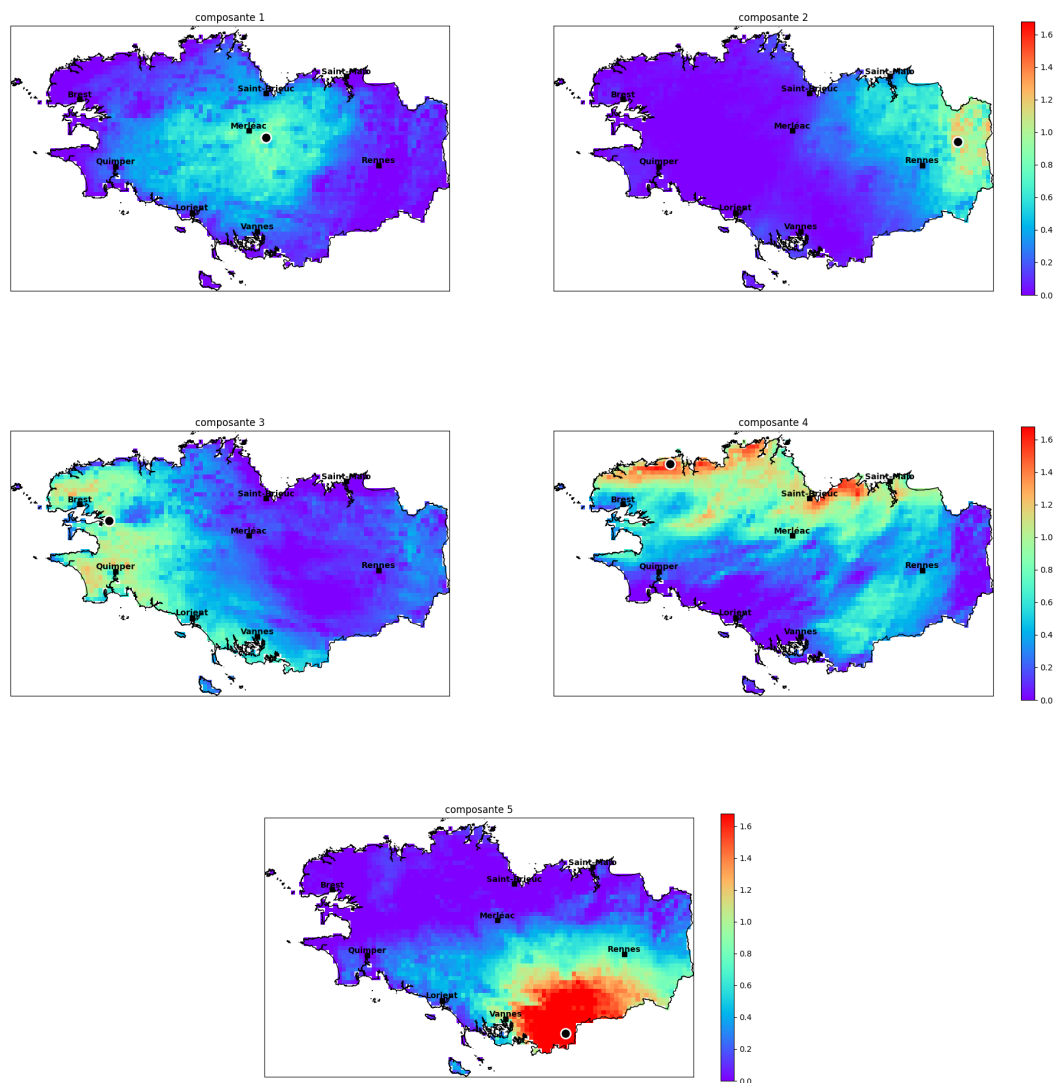


FIGURE 9.1 – Analyse par composante des concentrations de NH_3 modélisées par EsmeraldaHR sur la période de référence 2023.

1.3 Analyse du modèle Ensemble

L'analyse par composante du modèle Ensemble illustrée dans les figures 9.2 met en évidence 4 zones d'intérêt :

- Le centre Bretagne et le nord des Côtes d'Armor, où est implantée la station de fond rurale Kergoff, lieu-dit de la commune de Merléac.
- L'ouest du Finistère.
- L'est de l'Ille et Vilaine, proche de Rennes.
- Le Morbihan.

À noter que les composantes 2 et 3 mettent en évidence des zones similaires et que la réponse de l'analyse par composante est faible.

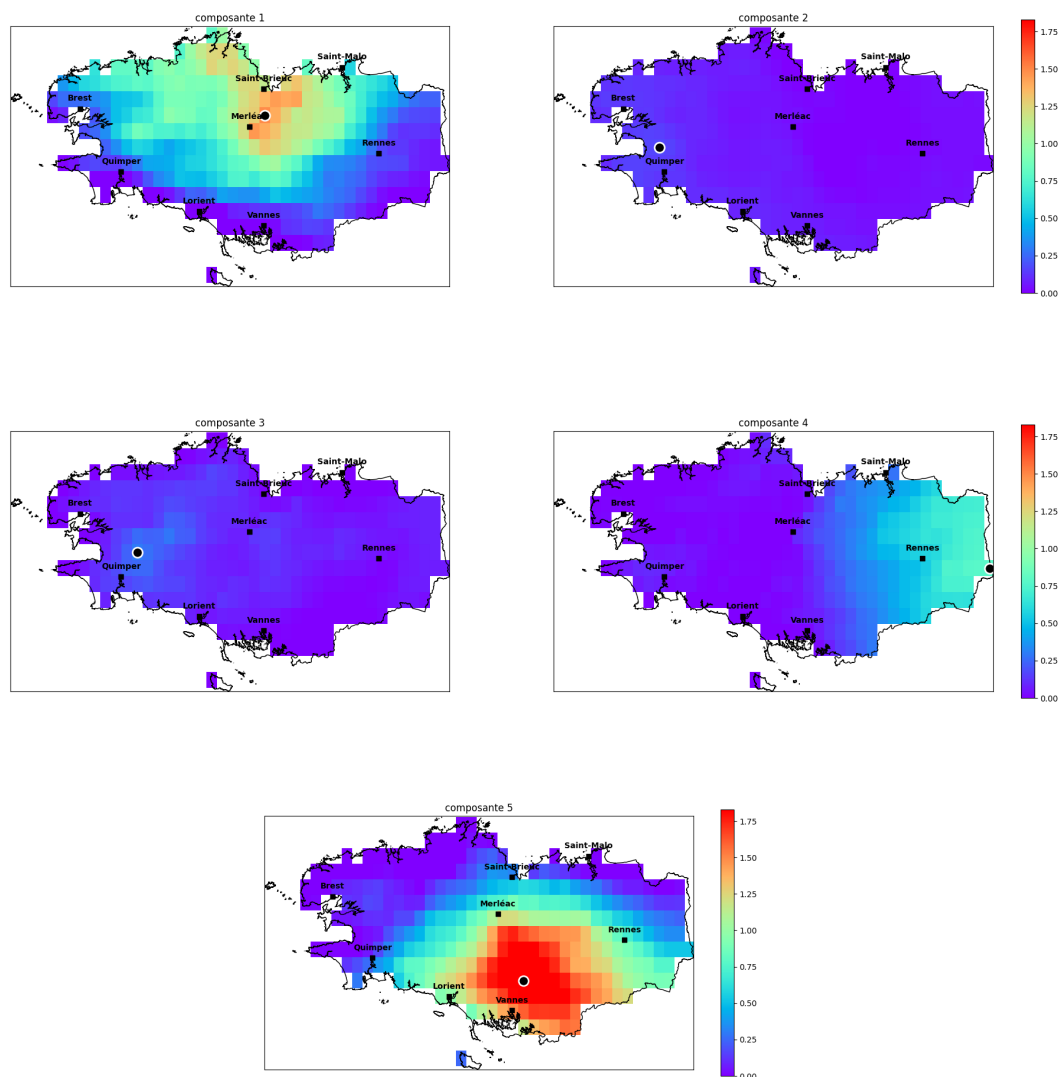


FIGURE 9.2 – Analyse par composante des concentrations de NH_3 modélisées par Ensemble de Copernicus sur la période de référence 2023.

10 Assimilation de données et prévision statistique

1 Assimilation de données

1.1 Méthode Blue

Afin de tenter d'améliorer les résultats de modélisation, les données de mesures vont être assimilées au modèle EsmeraldaHR. Cette assimilation sera effectuée à l'aide d'un outil, ModelBlue produit et fournis par Cyril Joly d'AirParif.

ModelBlue : La méthode d'assimilation utilisée ici est appelée méthode Blue et a été élaborée par Cyril Joly d'Airparif. Cette méthode s'appuie sur deux étapes principales :

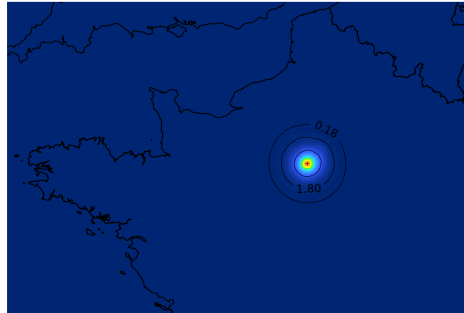
- Un débiaisement de la carte, c'est-à-dire une correction simple et homogène spatialement de toutes les mailles de la carte. La correction est effectuée par multiplication par une constante, calculée à partir d'une régression linéaire sans terme constant (intercept) entre les extractions stations de la carte et les mesures stations; c'est une étape que l'on retrouve dans le krigeage à dérive externe par exemple.
- Une spatialisation plus fine des erreurs du modèle débiaisé observées à chaque station, c'est là où BLUE intervient. BLUE utilise la matrice de covariance d'erreur du modèle comme motif de propagation.

L'assimilation nécessite également un jeu de trois hyperparamètres. Ces paramètres sont déterminés en réalisant une réanalyse du modèle que l'on désire assimiler sur une grande quantité de données en validation croisée avec comme objectif de minimiser la RMSE. Les hyperparamètres sont :

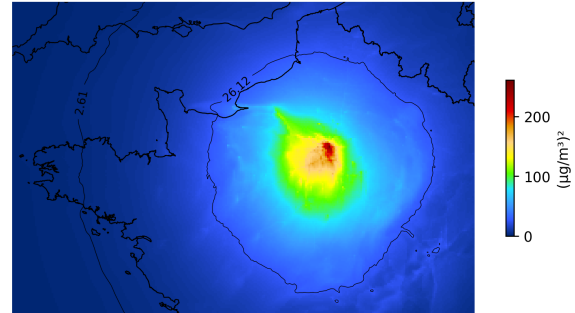
- 'r_obs' : Représente l'incertitude liée aux observations. Une valeur basse suggère que l'incertitude de mesure est faible et donc que la mesure est considérée fiable.
- 'scale_xy' : Est une distance représentant la zone d'influence d'une mesure.
- 'std_xb_min' : Fixe une valeur minimale à la covariance d'erreur du modèle.

Les hyperparamètres utilisés ont donc une influence sur l'assimilation en modifiant l'action corrective d'un point de mesure sur les mailles du modèle. L'une des manières de visualiser l'impact de ces paramètres est de tracer la matrice de covariance du modèle que la méthode Blue utilise pour assimiler la donnée. La figure 10.1 représente la matrice de covariance.

Covariance modélisée entre la maille 25200 et les autres
avec 'scale_xy' = 10000



Covariance modélisée entre la maille 25200 et les autres
avec 'scale_xy' = 100000



Covariance modélisée entre la maille 25200 et les autres
avec 'scale_xy' = 300000

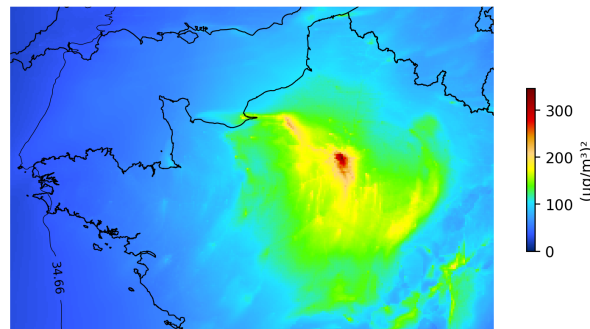


FIGURE 10.1 – Covariance d'erreur du modèle à assimiler pour les PM_{10} en fonction du paramètre 'scale_xy' c'est-à-dire la zone d'influence à donner à une mesure.

1.2 Présentation du jeu de données de mesure

Comme évoqué dans le chapitre 7, les données de mesures de NH_3 sont rares en 2023. De plus, elles ne sont pas facilement accessibles dans le cadre d'un outil de production. Les cartes d'assimilation sont donc réalisées en n'utilisant que les données produites par Air Breizh. De plus, la période d'étude est, comme pour la partie 8, réduite à la période estivale de 2023 pour maximiser les données disponibles et étudier une période d'activité agricole plus importante.

La table 10.1 présente une description des données de mesures retenues pour l'assimilation, une synthèse statistique est également illustrée table 10.2.

Attention particulière :

- Les trois sites du territoire pilote du projet ABAA, situés sur la commune de Plouarzel et influencés par l'activité agricole, sont implantés à seulement 3 km de distance les uns des autres et ne sont pas différenciés avec la résolution du modèle EsmeraldaHR (3 km).
- Compte tenu du démarrage des mesures sur les territoires, seule **la période du 1^{er} mars au 30 septembre 2023 sera étudiée.**
- Les données ayant un taux de représentativité inférieur à 75% sont bien utilisées lors de l'assimilation pour les dates couvertes par la mesure, mais ne seront pas utilisées pour calculer les scores.

TABLE 10.1 – Présentation des sites de mesures NH₃ retenus

Sites avec analyseurs NH ₃			
Site	Nature	Période de prélèvement	Critères et Emplacement de la mesure
Kergoff	Rural	décembre 2021 - aujourd'hui	Station rurale nationale de fond MERA (Mesure et Évaluation en zone Rurale de la pollution Atmosphérique à longue distance), implantée en Centre Bretagne. Elle est implantée à proximité d'une parcelle agricole.
Macé	Urbaine	janvier à octobre 2023	Station urbaine de fond, implantée à Brest (29).
Site Nord	Agricole	mars 2023 - juillet 2024	Station agricole locale, implantée dans le Finistère Nord (29), commune de Plouarzel, territoire pilote ABAA.
Site Ouest	Agricole	juillet 2023 - juillet 2024	Station agricole locale, implantée dans le Finistère Nord (29), commune de Plouarzel, territoire pilote ABAA.
Site Sud	Agricole	octobre 2023 - juillet 2024	Station agricole locale, implantée dans le Finistère Nord (29), commune de Plouarzel, territoire pilote ABAA.

TABLE 10.2 – Statistiques sur les données d'observations du 1^{er} mars au 30 septembre 2023

	Kergoff	Site Nord	Site Ouest	Site Est	Macé
Taux de représentativité	91.87	92.08	41.05	2.64	90.50
Valeur moyenne	4.46	8.62	7.70	6.83	2.80
Écart type	2.72	8.02	5.92	7.00	1.80
Valeur minimale	0.79	0.84	0.42	2.84	0.34
Valeur maximale	20.10	70.97	64.12	72.68	17.02
Percentile 75	5.68	11.67	10.53	6.54	3.85
Percentile 80	6.35	13.67	11.49	7.24	4.20
Percentile 90	8.16	19.39	14.95	11.98	5.10
Percentile 95	9.92	25.39	18.46	14.85	6.10
Percentile 99	13.54	37.58	28.51	28.75	8.49

1.3 Cartes de modélisations assimilées

Les résultats cartographiques présentés figure 10.2 sont réalisés en appliquant les hyperparamètres fournis par airparif d'une part et également en utilisant des paramètres déterminés par analyse du jeu de données d'Air Breizh. Les valeurs fixées des hyperparamètres sont les suivantes :

- Hyperparamètres d'Airparif : $r_{\text{obs}} = 0.08$, $\text{scale}_{\text{xy}} = 94865$, $\text{std}_{\text{xb_min}} = 61$.
- Hyperparamètres déterminés par Air Breizh : $r_{\text{obs}} = 0.096$, $\text{scale}_{\text{xy}} = 246135$, $\text{std}_{\text{xb_min}} = 8.7$.

La différence notable concerne le paramètre scale_{xy} (distance d'influence de la correction) plus important pour Air Breizh et une covariance d'erreur du modèle minimale $\text{std}_{\text{xb_min}}$ plus faible.

Les cartes produites sur l'ensemble du domaine Esmeralda permettent de mettre en évidence la première étape de l'assimilation bleue : le débiaisement. La carte est modifiée de manière homogène en utilisant un facteur correctif calculé à partir des mesures.

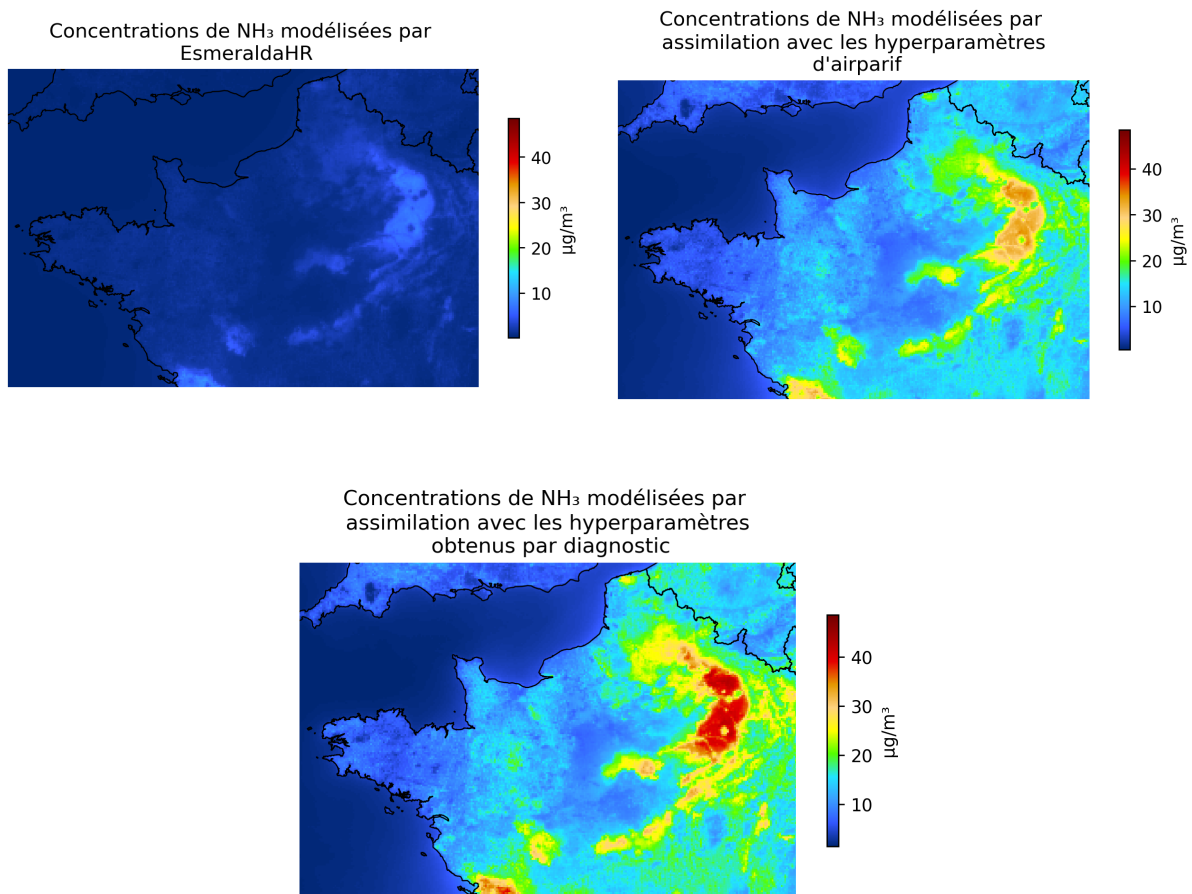


FIGURE 10.2 – Cartes de concentrations de NH_3 du 1^{er} mars au 30 septembre 2023 pour le modèle EsmeraldaHR (en haut à gauche), pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres fournis par Airparif (en haut à droite) et pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres d'Air Breizh (en bas) sur l'ensemble du domaine Esmeralda.

Les cartes figure 10.3 représentent les concentrations de NH_3 pour les modèles EsmeraldaHR et les modèles assimilés zoomées sur la Bretagne. Ces cartes montrent que le modèle assimilé utilisant les hyperparamètres d'Air Breizh accentue les concentrations, notamment sur l'ouest de la Bretagne et la région de Saint-Malo.

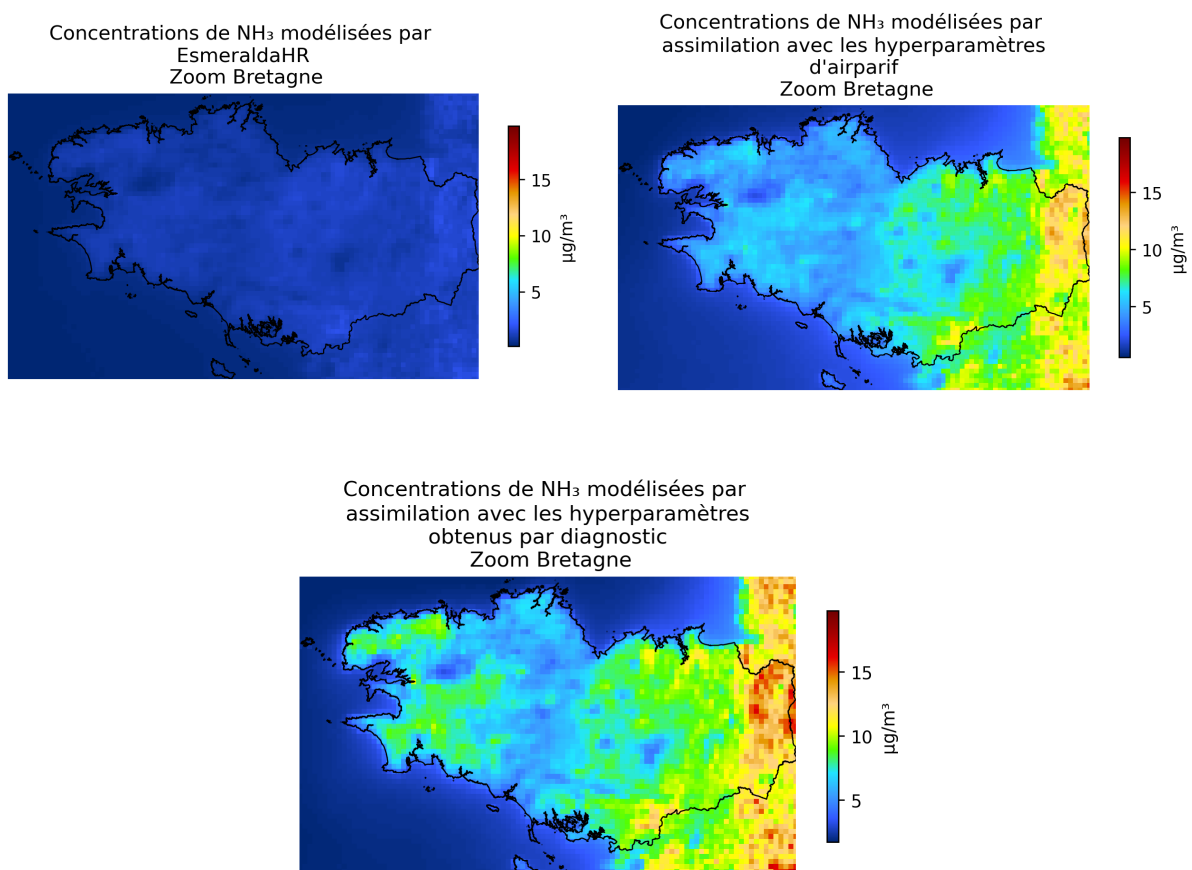


FIGURE 10.3 – Cartes de concentrations de NH_3 pour le modèle EsmeraldaHR (en haut à gauche), pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres fournis par Airparif (en haut à droite) et pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres d'Air Breizh (en bas) zoomées sur la Bretagne.

1.4 Présentation des scores

Scores simples

Les indicateurs statistiques utilisés ici sont les mêmes que ceux présentés section 7.1.

Les figures 8.3 représentent, sous forme d'histogramme, la corrélation, le biais moyen et la RMSE pour les modèles étudiés à J+0.

Les modèles présentés sont les mêmes que pour les chapitres 7 et 8 afin de comparer les scores du modèle assimilé avec ceux du modèle brut EsmeraldaHR et des autres modèles étudiés (PREV'AIR, Chimère, Mocage et Ensemble de COPERNICUS).

Les modèles assimilés lors de cette étude sont nommés :

- **AssimilationABAA**, avec application des hyperparamètres actuels d'Airparif;
- **AssimilationABAA2**, avec application des hyperparamètres produits à partir des données d'Air Breizh.

Les deux modèles assimilés calculés lors de cette exploration présentent des scores améliorés par rapport à tous les autres modèles étudiés : une RMSE divisée par deux, un biais moyen réduit voire nul et une corrélation de Pearson supérieure à 0.7. Cependant, AssimilationABAA2 obtient de meilleurs scores pour l'ensemble des indicateurs statistiques retenus.

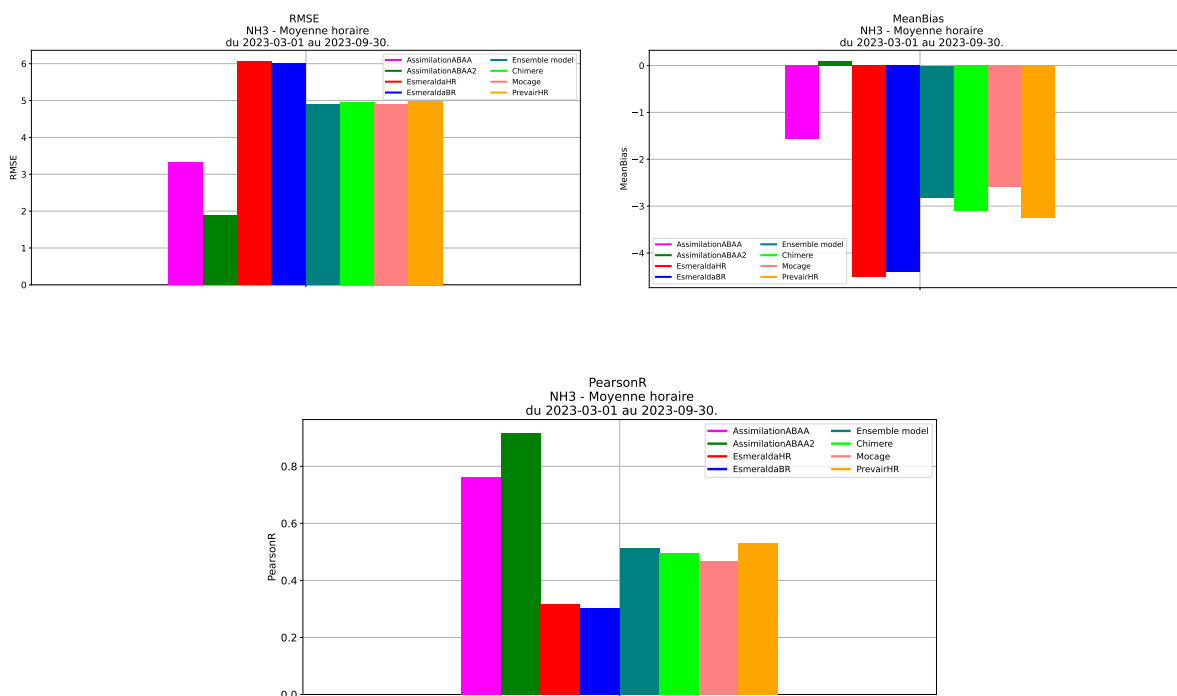


FIGURE 10.4 – RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)

Scores par gamme de concentration

Les figures 10.5 représentent, sous forme d'histogramme, le biais moyen et la RMSE pour différentes gammes de concentration. Tous les modèles sous-estiment les concentrations, cependant les deux modèles assimilés ne sous-estiment que les concentrations élevées ($> 20 \mu\text{g.m}^{-3}$). De la même manière, les modèles assimilés obtiennent une meilleure RMSE pour toutes les gammes de concentration.

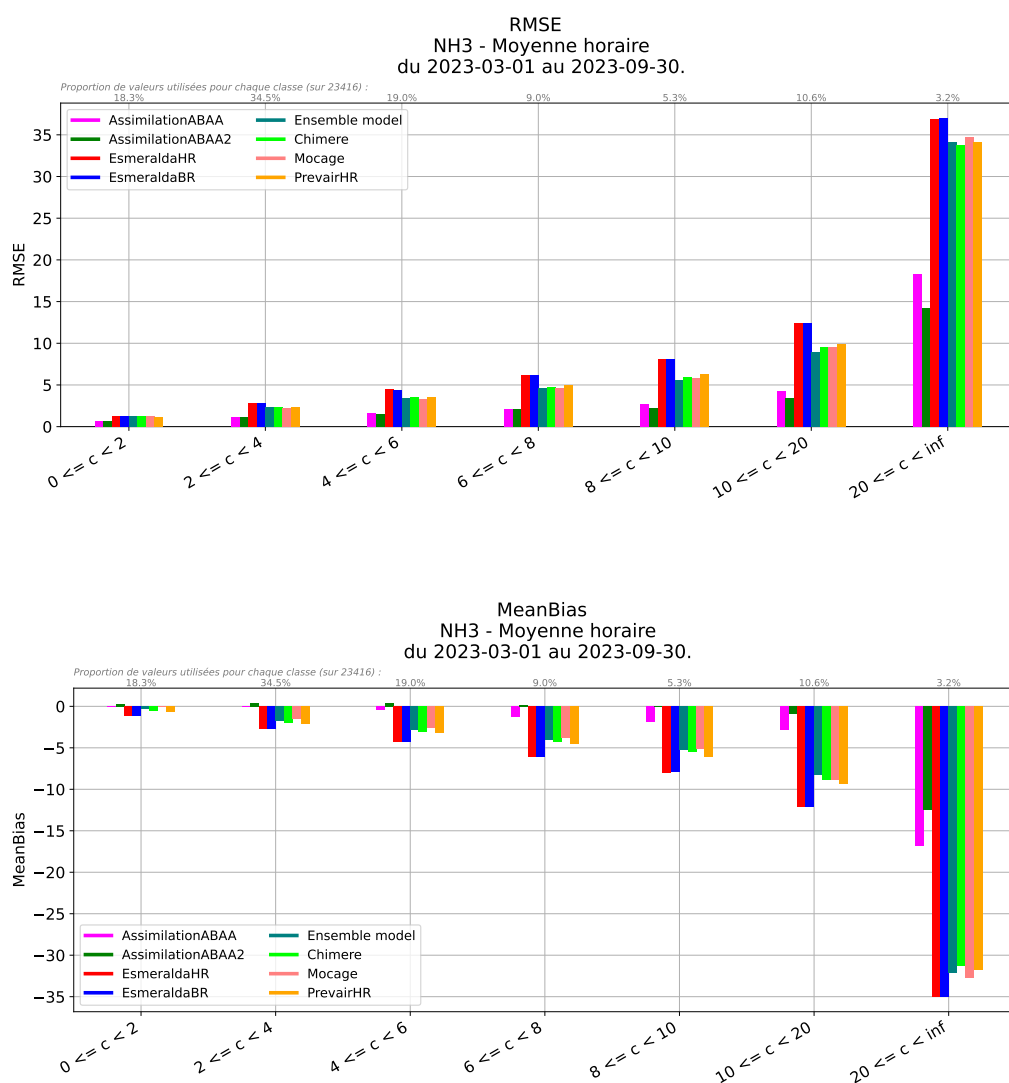


FIGURE 10.5 – RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélations (en bas) pour différentes gammes de concentration

2 Prévision statistique

L'objectif de la prévision statistique est de produire une modélisation prévisionnelle des concentrations d'ammoniac en utilisant les mesures disponibles sur le territoire Breton. Ces prévisions seront mises à disposition des prévisionnistes d'Air Breizh dans l'outil interne Cassandra.

2.1 Méthode

La prévision statistique consiste à améliorer une sortie de prévision existante à l'aide de données de mesures disponibles sur le domaine du modèle. La prévision statistique se fait en deux temps :

- Un court apprentissage sur sept jours de données à l'aide de toutes les sorties de modélisations disponibles sur le domaine et des données de mesures. Une régression linéaire est effectuée des données modélisation afin de recréer la mesure et ainsi permettre de calculer une mesure "virtuelle" pour tous les pas de temps manquant de J+0 à J+2.
- Les données de mesures historiques et recalculées sont ensuite assimilées sur un modèle de base, ici EsmeraldaHR, à l'aide de la méthode ModelBlue présentée section 1.

Le graphique figure 10.6 présente un exemple de prévision statistique réalisée avec la même méthode par Airparif pour les PM₁₀. Les différents modèles sont indiqués à droite de la figure. La mesure à la station est représentée en vert et la mesure virtuelle recalculée après régression linéaire des modèles et représentée en orange avec sa fenêtre de confiance.

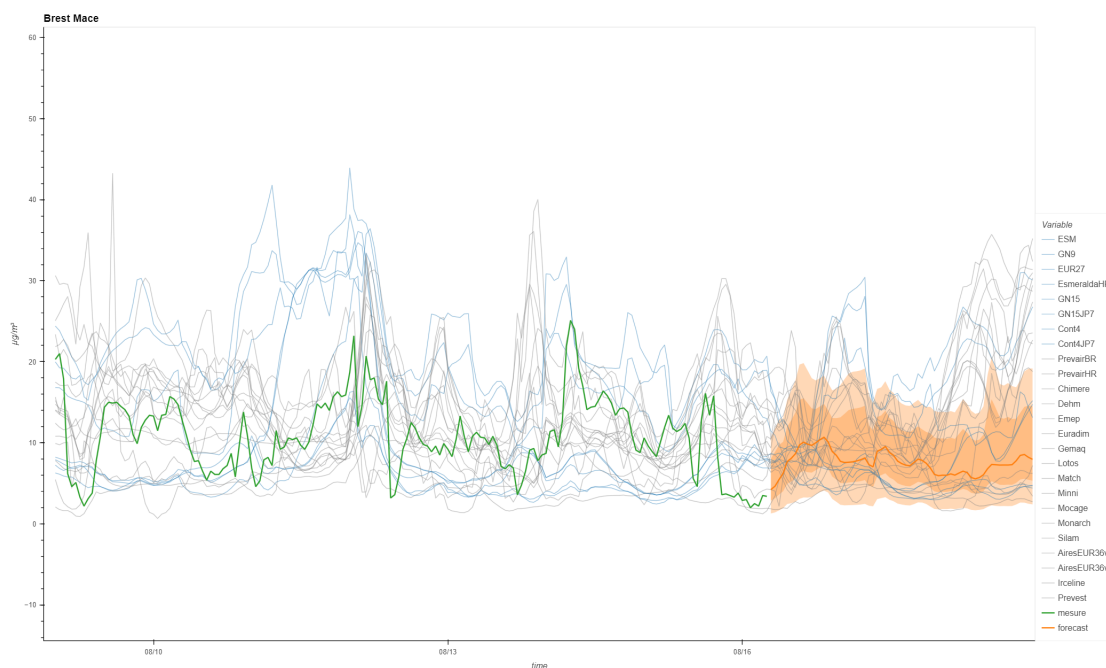


FIGURE 10.6 – Graphique d'une prévision statistique pour les PM₁₀ à la station Brest Mace

3 Conclusion assimilation et prévision statistique

L'assimilation de données d'ammoniac à l'aide de la méthode Blue fournie par Airparif a permis de considérablement améliorer les scores aux stations du modèle EsmeraldaHR. Une prévision à J+2 a également été produite à l'aide de la méthode d'assimilation couplée à une prévision statistique afin de pouvoir être intégrée à l'outil interne Cassandre. Les performances de cette prévision seront étudiées quand suffisamment de données seront disponibles.

Attentions particulières :

- Le nombre de stations disponibles pour l'ammoniac est faible. Aussi, la qualité de l'assimilation de données n'est pas idéale. De plus, à ce jour les données de NH_3 du réseau AASQA ne sont pas accessibles facilement. Seules les données d'Air Breizh sont donc utilisées dans le cadre de l'assimilation et de la prévision statistique.
- En raison du nombre très faible de stations d'ammoniac évoqué ci-dessus, il n'est pas possible de calculer un jeu de paramètres satisfaisants. Aussi, les paramètres utilisés ont été réalisés à partir des données des polluants réglementaires (PM_{10} , PM_{25} , NO_2 , O_3). Il sera nécessaire de réitérer cet exercice quand le réseau de mesure se sera étoffé afin d'améliorer les résultats.

11 Conclusion

L'action modélisation B2.2 du projet ABAA a été une opportunité de développement considérable sous de nombreux aspects. Elle **a permis** :

- **De renforcer notre partenariat avec Airparif** (AASQA d'Île-de-France) dans le cadre de l'évolution la plateforme ESMERALDA;
- **De monter en compétence sur de nouveaux outils numériques performants** (partagés par Airparif et développés en interne) nécessaires pour mener à bien l'action;
- **De mieux comprendre le phénomène de volatilisation** de l'ammoniac du sol vers l'atmosphère;
- **D'améliorer nos connaissances de la plateforme ESMERALDA** et d'intégrer de nouvelles sources de données telles que les modélisations du consortium COPERNICUS.

L'indice de volatilisation, créé pour l'application web AgriVision'Air (Action B2.3), permet de déterminer les conditions de volatilisation dans l'atmosphère. Il permet ainsi aux agriculteurs d'estimer leurs pertes d'ammoniac non seulement en fonction de leurs pratiques mais également en fonction des conditions météorologiques. Cet indice est voué à évoluer en fonction du retour des experts mais également des développements dans les chaînes de modélisation sur lesquelles il se base. En effet, le modèle météorologique de la plateforme ESMERALDA MM5 a été remplacé en 2024 par WRF (Weather Research and Forecasting) et conduira à une première évolution de l'indice de volatilisation (évolution du calcul de l'indicateur à partir des paramètres météorologiques fournis par WRF).

Une première analyse de la performance des modélisations de l'ammoniac a été réalisée en les confrontant aux mesures déployées au cours de l'année 2022 par les AASQA du réseau ATMO France. Cette analyse a été complétée pour l'année 2023 en incluant le modèle PREV'AIR produit par l'INERIS. Les mesures déployées sur le territoire pilote (Pays de Brest) en 2023 par l'action B1 ont également été intégrées.

L'action B2.2 s'est poursuivie en 2024 avec le lancement des travaux d'assimilation des mesures du territoire pilote afin d'améliorer les performances des modèles et de mieux prévoir les épisodes printaniers de pollution particulaire liées à l'ammoniac. Cette assimilation est également utilisée en la couplant avec une prévision statistique pour produire une sortie de prévision de l'ammoniac qui sera par la suite intégrée au système de prévision d'Air Breizh (Action B4.3) et de surveillance (Action B4.2).

Enfin, **le projet ABAA a permis de faire évoluer le fonctionnement interne du service numérique d'Air Breizh par le biais d'une amélioration du stockage des modèles et de leurs exploitations, de la production des bilans annuels de la qualité de l'air et, prochainement, de la prévision opérationnelle.**

Liste des Figures

1.1	Arbre organisationnel du projet ABAA. Toute les actions et les relations entres elles sont représentées	8
2.1	Schéma de principe de Demetrios	10
3.1	Mécanismes engendrant la volatilisation de l'ammoniac (Rapport Nuage, Sanchez, 2019 [13])	12
4.1	Evolution typique de la hauteur de la CLA au cours d'une journée (Stull, 1998 [18])	17
4.2	Evolution typique du profil de température dans la CLA au cours d'une journée (Lambert, 2012 [8])	17
5.1	Schéma des niveaux σ_{gm} et σ_{gm1} .	23
5.2	Schéma des niveaux σ_{gm} et σ_{gm1} et des épaisseurs $thik$ et $thik1$.	24
5.3	Schéma des niveaux σ_{gm} et σ_{gm1} et des altitudes $alti$ et $alti1$.	25
5.4	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour la ville de Paris	28
5.5	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour le Havre	28
5.6	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Saint Jacques de la Lande	28
5.7	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Lille	29
5.8	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Cherbourg	29
5.9	Indicateur de stabilité $\frac{z}{LMO}$ pour Dinard	29
5.10	Carte de la vitesse de friction u^* ($m.s^{-1}$) en moyenne journalière pour le 18-07-2022	30
5.11	Cartographie de l'indicateur de stabilité pour le 18-07-2022	30
6.1	Illustration de la variation du flux solaire incident modélisé à Paris	32
6.2	Histogramme du nombre de jours comprenant un certain nombre de pas horaire dépassant un seuil S_p donné. Le seuil est fixé à 0 pour analyser le nombre de pas horaire "pluvieux" dans une journée typique.	35
6.3	Indice de volatilisation pour Dinard pour les tests où $S_p = [0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9, 1, 2, 3, 4 \text{ et } 5] \text{ mm}$ (S_v constant = $3m/s$).	36
6.4	Indice de volatilisation pour Dinard pour les tests où $S_v = [1, 2, 3, 4, 5, 8] \text{ m/s}$ (S_p constant = $1mm$)	38
6.5	Occurences des indices 1 en pourcentage du nombre total d'indice pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022 et en fonction du seuil S_p	39
6.6	Occurences des indices 3 (en rouge) et 4 (en bleu) en pourcentage du nombre total d'indice pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022 et en fonction du seuil S_v	39
6.7	Illustrations de la page d'accueil de l'application AgriVision'Air (à gauche) et d'un test de pratique d'épandage (à droite).	40
7.1	Carte des concentrations moyennes en $\mu g.m^{-3}$ de NH_3 modélisées par EsmeraldaHR le 20-08-2022 et créée à l'aide de Airpy et des modèles stockés par Démétrios.	41
7.2	Carte des régions couvertes par le domaine Esmeralda et emplacement des points de mesure NH_3 .	42
7.3	Diagrammes de distribution de densité pour chaque station de mesures exploitée dans l'étude	45
7.4	RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)	47
7.5	RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélations (en bas) pour différentes gammes de concentration.	48
7.6	Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+0.	49
7.7	Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+1.	49
7.8	RMSE, biais moyen et corrélation par typologie de stations.	50

7.9	RMSE, Biais moyen et corrélation pour les régions du domaine possédant de la donnée de mesure sur la totalité de la période étudiée.	51
7.10	RMSE, Biais moyen et corrélation pour les régions du domaine possédant de la donnée de mesure sur la totalité de la période étudiée à l'exception de la station Rocabey en Bretagne.	51
7.11	Biais moyen pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).	52
7.12	RMSE pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).	53
7.13	Corrélations pour la période hivernale (en haut à gauche), printanière (en haut à droite), estivale (en bas à gauche) et automnale (en bas à droite).	54
8.1	Diagrammes de distribution de densité pour chaque station de mesures exploitée dans l'étude . .	56
8.2	Concentrations moyennes journalières de NH ₃ aux stations de mesure - Bretagne	56
8.3	RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)	57
8.4	RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélation (en bas) pour différentes gammes de concentration.	58
8.5	Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+0.	59
8.6	Histogrammes du nombre de bonnes détections, de fausses détections et de détections manquées pour J+1.	59
8.7	RMSE, biais moyen et corrélation par typologie de stations.	60
8.8	RMSE, biais moyen et corrélation pour J+0, J+1 et J+2.	60
9.1	Analyse par composante des concentrations de NH ₃ modélisées par EsmeraldaHR sur la période de référence 2023.	63
9.2	Analyse par composante des concentrations de NH ₃ modélisées par Ensemble de Copernicus sur la période de référence 2023.	64
10.1	Covariance d'erreur du modèle à assimiler pour les PM ₁₀ en fonction du paramètre 'scale_xy' c'est-à-dire la zone d'influence à donner à une mesure.	66
10.2	Cartes de concentrations de NH ₃ du 1 ^{er} mars au 30 septembre 2023 pour le modèle EsmeraldaHR (en haut à gauche), pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres fournis par Airparif (en haut à droite) et pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres d'Air Breizh (en bas) sur l'ensemble du domaine Esmeralda.	68
10.3	Cartes de concentrations de NH ₃ pour le modèle EsmeraldaHR (en haut à gauche), pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres fournis par Airparif (en haut à droite) et pour l'assimilation utilisant les hyperparamètres d'Air Breizh (en bas) zoomées sur la Bretagne.	69
10.4	RMSE (en haut à gauche), biais moyen (en haut à droite) et corrélation (en bas)	70
10.5	RMSE (en haut), biais moyen (en bas) et corrélations (en bas) pour différentes gammes de concentration	71
10.6	Graphique d'une prévision statistique pour les PM ₁₀ à la station Brest Mace	72

Liste des Tables

5.1	Corrélations pour Paris	28
5.2	Corrélations pour Havre	28
5.3	Corrélations pour Rennes-Saint_Jacques	28
5.4	Corrélations pour Lille	29
5.5	Corrélations pour Cherbourg	29
5.6	Corrélations pour Dinard	29
6.1	Table rassemblant les différentes combinaisons possibles de seuils et de paramètre de stabilité	33
6.2	Caracterisation des tests de sensibilité effectués	34
6.3	Occurences de chaque indice de volatilisation pour un seuil S_v de 5 m/s pour la période du 01-01-2022 au 14-08-2022.	37
7.1	Description du jeux de données de mesures sur l'année 2022. Les valeurs sont exprimées en $\mu g.m^{-3}$	43
7.2	Table récapitulatif des percentiles 90, 95 et 99 pour chaque station et la moyenne.	46
7.3	Scores pour le NH_3 à J+0	47
8.1	Statistiques sur les données d'observations	55
8.2	Scores pour NH_3 à J+0	57
10.1	Présentation des sites de mesures NH_3 retenus	67
10.2	Statistiques sur les données d'observations du 1 ^{er} mars au 30 septembre 2023	67

Références

- [1] AirBreizh. Campagne de caractérisation chimique des pm_{2,5} et de suivi de l'ammoniac à saint-malo, 2023. URL <https://www.airbreizh.asso.fr/publication/campagne-de-caracterisation-chimique-des-pm25-et-de-suivi-de-lammoniac-a-saint-malo/>.
- [2] AirBreizh and CRAB. Le monde évolue, les pratiques aussi, 2021. URL <https://lifeabaa2021.eu/>.
- [3] D.W. Bussink, J.E.M. Huijsmans, and J.J.M.H. Ketelaars. Ammonia emission from nitric-acid-treated cattle slurry surface applied to grassland. *NJAS : wageningen journal of life sciences*, 42, 12 1994. doi : 10.18174/njas.v42i4.590.
- [4] Lucas Garcia, Sophie Générmont, Carole Bedos, Nadler Simon, Patricia Garnier, Benjamin Loubet, and Pierre Cellier. Accounting for surface cattle slurry in ammonia volatilization models : The case of volt'air. *Soil Science Society of America Journal*, 76 :2184, 11 2012. doi : 10.2136/sssaj2012.0067.
- [5] Sophie Générmont and Pierre Cellier. A mechanistic model for estimating ammonia volatilization from slurry applied to bare soil. *Agricultural and Forest Meteorology*, 88 :145–167, 12 1997. doi : 10.1016/S0168-1923(97)00044-0.
- [6] Sasha Hafner, Andreas Pacholski, Shabtai Bittman, William Burchill, Wim Bussink, Martin Chantigny, Marco Carozzi, Sophie Générmont, Christoph Häni, Hans Martin Nørregaard Hansen, J.E.M. Huijsmans, Derek Hunt, Thomas Kupper, Gary Lanigan, Benjamin Loubet, Tom Misselbrook, J.J. Meisinger, Albrecht Neftel, T. Nyord, and S.G. Sommer. The alfam2 database on ammonia emission from field-applied manure : Description and illustrative analysis. *Agricultural and Forest Meteorology*, 258 :66–79, 12 2018. doi : 10.1016/j.agrformet.2017.11.027.
- [7] IPSL. Chimere - simulation de la pollution atmosphérique. URL <https://www.ipsl.fr/Nos-recherches/Chimie-atmospherique-et-qualite-de-l-air/Modelisation-numerique/CHIMERE>.
- [8] Dominique Lambert. Cours de météorologie dynamique et turbulences - master sciences de l'océan, de l'atmosphère et du climat (soac) - université paul sabatier. 2012.
- [9] LCSQA. Guide méthodologique pour le calcul des statistiques relatives à la qualité de l'air, 2016. URL https://www.lcsqa.org/system/files/media/documents/lcsqa2016-guide_calcul_statistiques_qa-drc-16-159667-08455a.pdf.
- [10] MétéoFrance. Qualification du vent. URL http://files.meteofrance.com/files/glossaire/FR/glossaire/designation/658_curieux_view.html.
- [11] A.S. Monin and A.M. Obukhov. Basic laws of turbulent mixing in the surface layer of the atmosphere. page 30, 1954.
- [12] NCAR. Welcome to the pennsylvania state university / national center for atmospheric research numerical model home page. URL <https://a.atmos.washington.edu/~ovens/newwebpage/mm5-home.html>.
- [13] Sanchez. Contribution d'airparif au projet nuage, 2019.
- [14] Joseph S. Scire, Françoise R. Robe, Mark E. Fernau, and Robert J. Yamartino. A user's guide for the calmet meteorological model, 2000.
- [15] S.G. Sommer and Jørgen Olesen. Modelling ammonia volatilization from animal slurry trail hose applied to cereals. *Atmospheric Environment*, 34 :2361–2372, 12 2000. doi : 10.1016/S1352-2310(99)00442-2.
- [16] S.G. Sommer, Jørgen Olesen, and B. Christensen. Effects of temperature, wind speed and air humidity on ammonia volatilization from surface applied cattle slurry. *The Journal of Agricultural Science*, 117 :91 – 100, 08 1991. doi : 10.1017/S0021859600079016.
- [17] S.G. Sommer, Sophie Générmont, Pierre Cellier, Nicholas Hutchings, Jørgen Olesen, and Thierry Morvan. Processes controlling ammonia emission from livestock slurry in the field. *European Journal of Agronomy*, 19 :465–486, 08 2003. doi : 10.1016/S1161-0301(03)00037-6.
- [18] Roland B. Stull. An introduction to boundary layer météorologie. 1998.

- [19] R.B. Thompson, B. Pain, and D. Lockyer. Ammonia volatilization from cattle slurry following surface application to grassland .1. influence of mechanical separation, changes in chemical-composition during volatilization and the presence of the grass sward. *Plant and Soil*, 125 :109–117, 01 1990.
- [20] Richard Wilson. Cours de météorologie dynamique et turbulences - master sciences de l'océan, de l'atmosphère et du climat (soac) - parcours météorologie, océanographie, climat, ingénierie pour les observations spatiales - sorbonne université. 2013.

Financeurs du projet

Le projet ABAA est lauréat du programme LIFE de l'Union Européenne et a le soutien financier de la région Bretagne ainsi que du Plan Régional Santé Environnement piloté par le préfet de région, l'Agence Régionale de Santé et le conseil régional.



Le PRDA de Bretagne apporte son soutien à la Chambre régionale d'Agriculture et le Réseau Mixte Technologique Bouclage a labellisé le projet ABAA.



Pour plus d'informations sur le rapport ou le projet :

Lifeabaa2021@airbreizh.asso.fr

<https://lifeabaa2021.eu/>