

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

Université 20 Août 1955- Skikda

Faculté de Technologie

Département de Génie Electrique

Réf. : D012119007D



Thèse

En vue de l'obtention du diplôme de :

Doctorat LMD

Spécialité : AUTOMATIQUE

Thème

**Contribution à la surveillance de la qualité de l'air dans
un site industriel par les prédicteurs neuronaux**

Par : **Djebbri Nadjjet**

Soutenu Le : 14/04/2019 Devant Le Jury:

Président	LACHOURI Abderrazek	Pr	Université de Skikda
Rapporteur	ROUAINIA Mounira	Pr	Université de Skikda
Examineurs	HARIZE Saliha	Dr	Université d'Annaba
	MEHENNAOUI Lamine	Dr	Université de Skikda
	GUECHI El Hadi	Dr	Université de Skikda

Remerciements

Je remercie ALLAH qui m'a donné la force, la volonté et la patience tout au long de mes études pour accomplir ce travail de thèse.

Je tiens à remercier particulièrement la directrice de thèse Professeur **ROUAINIA Mounira** pour l'encadrement, les directives, l'encouragement, Je tiens à lui témoigner ma profonde gratitude, pour son suivi, son aide, sa patience, sa gentillesse, sa grande disponibilité et responsabilité, et pour m'avoir guidée durant toutes mes années de recherche dans la réalisation de ce travail.

Je tiens à remercier chaleureusement, Monsieur **LACHOURI Abderazek**, Professeur à l'université de Skikda et mon grand enseignant, d'avoir accepté la présidence du jury de ma soutenance.

Je remercie également les membres de jury d'avoir accepté de juger mon travail de thèse.

Je tiens aussi à remercier infiniment tous les membres du comité de formation de doctorat LMD en Automatique pour leurs contributions aux succès de notre formation.

Finalement, je remercie tous ceux qui ont participé de près ou de loin à l'élaboration de ce travail même par un mot d'encouragement.

À tous mes enseignants tout le long de ma formation à l'université de Skikda

Merci à tous

Dédicaces

Je dédie ce travail

À toute ma famille,

À tous mes enseignants, mes étudiants, mes amis, mes collègues et tous ceux qui m'ont encouragée.

NADJET DJEBBRI

ملخص

تمثل مراقبة تلوث الهواء إشكالية ذات أهمية كبرى، خاصة في المواقع الصناعية حيث يمكن أن تكون عواقب مثل هذا التلوث خطيرة، يندرج هذا العمل ضمن هذا الإطار ويهدف إلى المساهمة في مراقبة تلوث الهواء في موقع صناعي.

يرتكز هذا العمل على استغلال طرق الذكاء الاصطناعي المتمثلة في الشبكات العصبية الاصطناعية التي تستخدم قياسات تراكيز الملوثات (CO , NO_x) في الموقع الصناعي (GLIK - سكيكة) .

في الشطر الأول من عملنا نقوم بالرصد المكاني للتلوث باستغلال نمذجة التوزيع المكاني للملوثات بواسطة نموذج كيمياء النقل ، حيث تحل معادلة التشتت التفاعلية بنموذج فووس، بعد ذلك نتطرق إلى إسهامنا الأساسي المرتكز على مراقبة الملوثات بواسطة الشبكات العصبية الاصطناعية، ونعتمد على دراسة نماذج الشبكات العصبية الاصطناعية التالية : شبكة بيرسبترون متعدد الطبقات (MLP) ، شبكة الانحدار الذاتي غير الخطي مع المدخلات الخارجية (NARX)، وشبكة دالة القاعدة الشعاعية (RBF) . بعدها مقارنة نتائج التنبؤ بواسطة هذه النماذج تمكنا من اختيار النموذج الأمثل.

تبين النتائج أن الشبكة العصبية لدالة القاعدة الشعاعية تعطي تنبؤاً أفضل لتراكيز الملوثات، و لذلك ، يتم إدخال تحسين في التنبؤ من خلال تحسين معامل الانتشار لنموذج RBF ، واستخدام مجموعة من البيانات التي تحتوي على تراكيز الملوثات مع معطيات الأرصاد الجوية.

الكلمات المفتاحية - 1) مراقبة تلوث الهواء، 2) نموذج التشتت التفاعلي، 3) الشبكات العصبية، 4) التنبؤ.

Résumé

La surveillance de la pollution atmosphérique revêt une importance majeure notamment dans les sites industriels où les conséquences de ces pollutions peuvent être graves. Ce travail entre dans ce cadre et a pour objectif de contribuer à la surveillance de la pollution atmosphérique dans un site industriel

Nous exploitons pour ce faire, un ensemble de méthodes d'intelligence artificielle basées sur les réseaux de neurones et exploitant les mesures de concentrations de polluants (NO_x , CO) dans un site industriel (GLIK-Skikda).

Dans un premier temps, nous procédons au suivi spatial de la pollution en exploitant une modélisation de la distribution spatiale des polluants par le modèle de chimie-transport, dont l'équation de dispersion réactive est résolue par le modèle gaussien. Par la suite notre contribution principale concerne la surveillance des polluants par les réseaux de neurones. Les modèles de réseaux neuronaux considérés sont : multi couches perceptron (MLP), autorégressif non linéaire à entrées exogènes (NARX) et fonction radiale de base (RBF). La comparaison entre les résultats nous permettra de procéder à l'amélioration de la surveillance en optimisant l'approche choisie.

Les résultats montreront que le réseau de neurone à fonction radiale de base donne une meilleure prédiction des concentrations de polluants. Par la suite, une amélioration de la prédiction est introduite en optimisant le paramètre de propagation du modèle RBF, et en exploitant un ensemble de données contenant des concentrations de polluants combinées avec les données météorologiques.

Mots-clés - 1) Surveillance de la pollution atmosphérique 2) Modèle de dispersion réactive; 3) Réseaux de neurones ; 4) Prédiction.

Abstract –

Air pollution monitoring constitutes a major task, especially in industrial sites where the consequences of such pollution can be serious. This work falls within this framework and aims to contribute to air pollution monitoring in an industrial site.

In this perspective, we will use a set of artificial intelligence methods based on artificial neural networks and using pollutants concentration (NO_x , CO) measurements in an industrial site (GL1K-Skikda).

Firstly, we carry out spatial monitoring of pollution by exploiting a modeling of the spatial distribution of pollutants by the transport-chemistry model, whose reactive dispersion equation is solved by the Gaussian model. Subsequently, our main contribution concerns the monitoring of pollutants by neural networks. Neural network models considered are: multi-layer perceptron (MLP), non-linear autoregressive with exogenous inputs (NARX) and radial basis function (RBF). The comparison between the results will enable us to improve the monitoring by optimizing the chosen approach.

The results will show that the radial basis function based neural network gives a better prediction of pollutant concentrations. Subsequently, an improvement in the prediction is introduced by optimizing the propagation parameter of the RBF model, and by exploiting a set of data containing concentrations of pollutants combined with meteorological data.

Keywords - 1) Air pollution monitoring; 2) Reactive dispersion model; 3) neural networks; 4) Prediction.



SOMMAIRE

Liste des figures.....	V
Liste des tableaux.....	VIII
Liste des symboles.....	IX
INTRODUCTION GENERALE	1

Chapitre I : La pollution atmosphérique

1 Introduction	4
2. La pollution atmosphérique	4
2.1.Définition	4
2.2.Historique	4
2.3.Les sources de pollution	5
2.3.1.Les émissions naturelles	5
2.3.2.Les émissions d'origine agricole	6
2.3.3.Les émissions industrielles	6
2.3.4.Les émissions domestiques.....	6
2.3.5.Les émissions dues aux transports.....	6
2.3.6.Les émissions dues aux traitements des déchets	7
2.4.Problématique de la pollution industrielle	7
2.5.Les principaux polluants	7
2.5.1.Les polluants primaires.....	7
2.5.1.1. Les oxydes d'azote (NO _x)	8
2.5.1.2. Les Composés Organiques Volatils (COV).....	8
2.5.1.3. Le dioxyde de soufre (SO ₂)	9
2.5.1.4. Le monoxyde de carbone (CO)	9
2.5.1.5. Les particules en suspension.....	9
2.5.1.6. Le Méthane	9
2.5.2.Les polluants secondaires	10
2.6. La qualité de l'air et la surveillance de la qualité de l'air	12
2.7. L'indice de la qualité de l'aire	12
2.7.1.Indice de la qualité de l'aire mondiale.....	12
2.7.2.Indice de qualité de l'air européen	13
2.7.3.Indice de qualité de l'air algérien.....	13
3. Les capteurs de gaz	14
3.1. Schématisation du capteur	14
3.2. Les principales caractéristiques des capteurs de Gaz	16
3.2.1.Sensibilité	16
3.2.2.Sélectivité	17

3.2.3. Stabilité.....	17
3.2.4. Réversibilité.....	18
3.2.5. Temps de réponse et de recouvrement	18
3.2.6. Reproductibilité	18
3.3. Utilisation des capteurs dans la qualité de l'air	19
4. Les risques industriels liés à la pollution atmosphérique	19
4.1. Les risques sur l'Environnement et la santé	20
4.2. Pollution atmosphérique et mortalité	23
4.3. Impacts sanitaires et environnementaux	23
4.3.1. Impacts sur la santé.....	23
4.3.2. Impacts sur l'Environnement.....	24
4.4. Effets des NO _x et CO sur la santé et l'environnement	25
4.4.1. Effets du NO _x	25
4.4.2. Effets du CO	25
5. Conclusion.....	26
Références du chapitre I.....	27

Chapitre II : *Modélisation numérique des nuages de pollution*

1. Introduction.....	29
2. Problématique de la modélisation.....	29
3. La dispersion dans la couche limite atmosphérique	30
3.1. Eléments de micro-météorologie	30
3.1.1. Structure de l'atmosphère.....	30
3.1.2. Stabilité de l'atmosphère	31
3.1.2.1. Class de pasquil.....	33
3.1.2.2. Classes de Turner	33
3.2. La dispersion atmosphérique	34
3.2.1. Définition.....	34
3.2.2. Influence de la stabilité atmosphérique sur la dispersion d'un panache.....	34
a. L'atmosphère est neutre.....	35
b. L'atmosphère est stable	36
c. L'atmosphère est instable	36
3.2.3. Influence de la stratification thermique	37
3.3. Principales phases de la dispersion	38
a) Première phase : la surélévation du panache	38
b) Seconde phase : l'évolution du panache	38
c) Troisième phase : la diffusion à l'échelle régionale.....	38
d) Quatrième phase : le transport des polluants sur de longues distances.....	38
3.4. Facteurs météorologiques influant la dispersion des polluants atmosphériques	39
a) La température.....	39
b) La hauteur de la couche de mélange	40
c) Le vent.....	41
d) La topographie : effet mécanique et thermique.....	41

4. Le modèle CTM polaire 3D	42
4.1. Le modèle de chimie-transport	42
4.2. Traitement de la diffusion pour l'échelle locale	44
5. Modélisation de la dispersion atmosphérique	46
5.1. Modèles de dispersion atmosphérique	46
5.1.1. Modèles Lagrangiens (ou de trajectoire)	46
5.1.2. Modèles Eulériens	47
5.1.3. Modèles Gaussien	48
5.1.3.1. Présentation	48
5.1.3.2. Avantages du modèle gaussien	52
5.2. Sur-hauteur d'un panache chaud	52
5.2.1. Schématisation de la sur-hauteur d'un panache chaud	52
5.2.2. Formules de Briggs de la Sur-hauteur d'un panache chaud	54
6. Simulation et résultats des expérimentations numériques	54
6.1. La sur-hauteur en fonction du vent et de la stabilité	54
6.2. Les écarts types en fonction du vent et de la stabilité	55
6.3. Variation de la concentration	56
6.4. Variation de la sur-hauteur de nuage en fonction de la vitesse du vent	60
6.5. Variation des écarts-types de nuage en fonction de la vitesse du vent	60
7. Conclusion	62
Références du chapitre II	63

Chapitre III : *Les réseaux de neurones artificiels*

1 Introduction	65
2. Historique	65
3. Le neurone	67
3.1. Neurone biologique	67
3.2. Neurone artificiel (formel)	67
3.3. Principe du neurone artificiel	68
3.4. Fonctions d'activation du neurone artificiel	70
3.4.1. Fonction tout/ rien (à seuil)	70
3.4.2. Fonction linéaire	70
3.4.3. Fonction sigmoïde	70
4. Réseaux de neurones	71
4.1. Les étapes d'un réseau de neurones pour la prédiction	72
4.2. Les avantages des réseaux de neurones	72
5. Architecture des réseaux de neurones	73
5.1. Réseaux de neurones non bouclées	73
5.1.1. Réseaux de neurones complètement connectés	74
5.1.2. Réseaux de neurones à couches	74
5.2. Réseaux de neurones bouclés	75
6. L'apprentissage	76

6.1. Type d'Apprentissage des réseaux de neurones	77
6.1.1. Apprentissage supervisé	77
6.1.2. Apprentissage non supervisé	77
6.1.3. Apprentissage par renforcement	78
7. Modèles des réseaux de neurones	78
7.1. Le modèle MLP (Multi Layer Perceptron)	78
7.1.1. Définition.....	78
7.1.2. Structure du modèle.....	79
7.1.3. Equation du modèle MLP.....	79
7.1.4. Les avantages et les inconvénients des réseaux MLP	80
7.2. Le modèle NARX (Non Linéaire AutoRégressif eXogène)	80
7.2.1. Définition.....	80
7.2.2. Structure du modèle.....	81
7.2.3. Equation du modèle NARX.....	81
7.2.4. Les avantages et les inconvénients des réseaux NARX	81
7.3. Le modèle RBF (Radial Basis Function)	82
7.3.1. Définition.....	82
7.3.2. Structure du modèle.....	82
7.3.3. Equation du modèle RBF	82
7.3.4. Les avantages et les inconvénients des réseaux RBF	83
8. Exploitation des réseaux de neurone dans le suivi de la pollution atmosphérique	84
9. Conclusion	88
Références du chapitre III	89

Chapitre IV : *Simulation et résultats*

1. Introduction	94
2. Description des données	94
3. Indices de performance.....	94
4. Application des réseaux de neurone pour la prédiction du NO _x et CO	95
4.1. Résultat de la simulation.....	96
4.1.1. Le modèle MLP	96
4.1.2. Modèle NARX.....	99
4.1.3. Modèle de RBF.....	102
4.2. Comparaison des performances des trois méthodes	105
5. Amélioration de la méthode	107
5.1. Détermination du meilleur paramètre de propagation pour l'interpolation des concentrations.....	108
5.2. Développement de la Méthode	110
5.3. Résultats et discussion	110
6. Conclusion	114
Références du chapitre IV	116
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	117
ANNEXES	119

Liste des figures

Figure I-1	Augmentation de la concentration du méthane dans le monde durant les 30 dernières années.	10
Figure I-2	Schéma de principe d'un capteur de gaz	14
Figure I-3	Rôle d'un capteur chimique dans une chaîne complète	16
Figure I-4	Fractions particulières atteignant diverses parties du système pulmonaires	23
Figure II-1	la pollution atmosphérique	30
Figure II-2	Abaques des coefficients de dispersion de Briggs en milieu urbain	33
Figure II-3	nuage très stable	35
Figure II-4	nuage de stabilité neutre	46
Figure II-5	nuage instable	46
Figure II-6	nuage stable à partir du sol	46
Figure II-7	nuage instable à partir du sol	37
Figure II-8	Dispersion d'un panache de fumée en condition (a) stable, (b) neutre, (c) instable	37
Figure II-9	illustration de la diffusion suivent le modèle de panache : modèle gaussien	49
Figure II-10	Représentation d'une source en hauteur : h_s est la hauteur de source, et h est la hauteur effective du panache	53
Figure II-11	Evolution de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, la hauteur de la source $z=150m$	57
Figure II-12(a)	Variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur $Z_0=5m$; la hauteur de la source $z=150m$	57
Figure II-12(b)	Variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur $Z_0=5.2m$; la hauteur de la source $z=150m$	58
Figure II-12(c)	Variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur $Z_0=5.4m$; la hauteur de la source $z=150m$	58
Figure II-12(d)	Evolution de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la sur-hauteur; la hauteur de la source $z=150m$	58
Figure II-13	Evolution de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la distance x et de la sur-hauteur ; la hauteur de la source $z=150m$	59
Figure II-14	Evolution de la sur-hauteur de nuage z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage stable, neutre et instable	60
Figure II-15	Evolution de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage instable (A-D)	60
Figure II-16	Evolution de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage stable (E)	61

Liste des figures

Figure II-17	Evolution de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage très stable (F)	61
Figure III-1	Représentation d'un neurone biologique	67
Figure III-2	Modèle d'un neurone formel à n entrées	68
Figure III-3	Nœud d'un réseau de neurone	69
Figure III-4	Structure d'un réseau non récurrent	73
Figure III-5	Perceptron à une couche cachée	74
Figure III-6	Réseau de neurone bouclé	75
Figure III-7	Schéma bloc de l'apprentissage supervisé d'un réseau de neurone	77
Figure III-8	Schéma bloc de l'apprentissage non supervisé d'un réseau de neurone	78
Figure III-9	structure du modèle MLP	79
Figure III-10	structure du modèle NARX	81
Figure III-11	structure du modèle RBF	82
Figure IV-1	Structure du modèle MLP	96
Figure IV-2	Evolutions de l'EQMA, de l'EQMV et de l'EQMT au cours du processus d'apprentissage du réseau MLP	97
Figure IV-3	Prédiction du NO_x par le modèle MLP	97
Figure IV-4	Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle MLP	98
Figure IV-5	Prédiction du CO par le modèle MLP	98
Figure IV-6	Erreurs de prédiction du CO par le modèle MLP	98
Figure IV-7	structure du modèle NARX	99
Figure IV-8	Evolutions de l'EQMA, de l'EQMV et de l'EQMT au cours du processus d'apprentissage du réseau NARX	100
Figure IV-9	Prédiction du NO_x par le modèle NARX	100
Figure IV-10	Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle NARX	101
Figure IV-11	Prédiction du CO par le modèle NARX	101
Figure IV-12	Erreurs de prédiction du CO par le modèle NARX	101
Figure IV-13	structure du modèle RBF	102
Figure IV-14	Evolutions de l'EQMA, de l'EQMV et de l'EQMT au cours du processus d'apprentissage du réseau RBF	103
Figure IV-15	Prédiction du NO_x par le modèle RBF	103
Figure IV-16	Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle RBF	104
Figure IV-17	Prédiction du CO par le modèle RBF	104
Figure IV-18	Erreurs de prédiction du CO par le modèle RBF	104
Figure IV-19	Prédiction du NO_x par les trois modèles RBF, NARX et MLP	105
Figure IV-20	Prédiction du CO par les trois modèles RBF, NARX et MLP	106
Figure IV-21	schémas du réseau RBF	107
Figure IV-22	Algorithme d'estimation de h_{\max}	109

Figure IV-23	Erreur de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF1 (en utilisant uniquement des concentrations de polluants comme entrées) pour $h \in [0, 6]$	111
Figure IV-24	Erreur de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF2 (en utilisant uniquement des variables météorologiques comme entrées) pour $h \in [0, 6]$	111
Figure IV-25	Erreurs de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF3 (les concentrations de polluants sont combinées avec les variables météorologiques en tant qu'entrées) pour $h \in [0, 6]$	112
Figure IV-26	Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF1	112
Figure IV-27	Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF2	113
Figure IV-28	Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF3	113

Liste des tableaux

Tableau I-1	les temps de vie de certains COV	8
Tableau I-2	Valeurs guides de l'Organisation Mondiale de la Santé OMS pour les polluants classiques de la qualité de l'air extérieur	12
Tableau I-3	L'indice de la qualité de l'aire selon la définition de l'Agence européenne pour l'environnement (AEE)	13
Tableau I-4	La détermination des objectifs de qualité de l'air, des valeurs limites de pollution atmosphérique, des seuils d'information et des seuils d'alerte sont fixées sur une base moyenne annuelle	13
Tableau I-5	Classification de quelques types de capteurs de gaz selon leur principe de détection	19
Tableau I-6	Les risques pour l'Environnement et les risques pour l'homme des Principaux polluants	21
Tableau II-1	Classes de stabilité de Pasquill	33
Tableau II-2	Classes de stabilité de Turner	34
Tableau II-3	Formulation des écarts-types de la dispersion par Briggs pour le cas rural	50
Tableau II-4	Formulation des écarts-types de la dispersion par Briggs pour le cas urbain	51
Tableau II-5	Paramétrisation de la dispersion par Doury, en diffusion normale et faible	52
Tableau II-6	sur-hauteur en fonction du vent et de la stabilité	55
Tableau II-7	les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(A-D)$	55
Tableau II-8	les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(E)$	55
Tableau II-9	les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(F)$	55
Tableau III-1	Fonctions de transfert $f(x)$	71
Tableau IV-1	Les performances du modèle MLP	99
Tableau IV-2	Les performances du modèle NARX	102
Tableau IV-3	Les performances du modèle RBF	105
Tableau IV-4	Comparaison des performances du NO_x et CO par les trois modèles	106
Tableau IV-5	Variables de modèles	110
Tableau IV-6	Valeurs des erreurs hm et min pour les trois cas (RBF1, RBF2 et RBF3)	110
Tableau IV-7	Évolution de l'erreur absolue moyenne en fonction de la propagation à RBF3	111
Tableau IV-8	Erreurs quadratiques moyennes et erreurs absolues moyennes pour les trois cas (RBF1, RBF2 et RBF3)	114

Liste des symboles et abréviations

[C] _i	Concentration du gaz i
μ	Advection par le vent [m.s ⁻¹].
μ^*	Vitesse de frottement [m.s ⁻¹].
b	Emplacement.
Biais	Matrice de polarisation de la couche de sortie.
C	Concentration du polluant considère [μ g.m ⁻³].
C1	Capacité du capteur
CO	Monoxyde de carbone
COV	Composés Organiques Volatils
CTM	Modèles de chimie-transport
d	Le diamètre de la cheminée [m].
d ₂	Coefficient de détermination.
E	Terme représentant les émissions surfaciques [μ g.m ⁻² .s ⁻¹].
F	Fréquence
f	Fonction d'activation.
g	Accélération de la gravité 9.81 [m.s ⁻²].
GL1K	Gaz naturel liquéfié.
H	Hauteur de la source [m].
h	Propagation.
h _m	Meilleur paramètre de propagation.
K	Coefficient de diffusion turbulente
K _{mol}	Matrice des coefficients de diffusivité [m.s ⁻¹].
K _y	Coefficient de diffusivité turbulente latéral.
K _z	Coefficient de diffusivité turbulente vertical.
L	Nombre de couches dans le réseau.
LW	Matrice des connexions de la couche cachée à la couche de sortie.
MAE	Erreur absolue moyenne (<i>Mean Absolute Error en anglais</i>).
MLP	Perceptron multicouche (<i>Multi Layer Perceptron en anglais</i>).
MSE	L'erreur quadratique moyenne (<i>Mean Squared Error en anglais</i>).
NARX	Autorégressif non linéaire à entrées exogènes (<i>Non-linear AutoRegressive with eXogenous inputs en anglais</i>).
N _i	Nombre de neurones de la couche (i).
NO	Monoxyde d'azote
NO ₂	Dioxyde d'azote
NO _x	Oxydes d'azote
O _i	Variables observées.
P _i	Variables prédites.
PM	Particules en suspension
ppb	Partie par milliard (part per billion) [10 ⁻⁹].
ppbv	Partie par billion en volume.
ppm	Partie par million (part per million) [10 ⁻⁶].
Q	Débit de la source [g.s ⁻¹].
R	Réponse du capteur
R	Valeur de résistances
R _{gaz}	Valeur de la résistance
R _{référence}	Valeur de concentration du gaz cible donnée
r _{relative}	Réponse relative du capteur

Liste des symboles et abréviations

R_2	Coefficient de corrélation.
RBF	Fonction Radiale de Base (<i>Radial Basis Function en anglais</i>).
R_H	Résistance de chauffage
R_L	Résistance de mesure
RMSE	Racine de la moyenne de l'erreur quadratique (<i>Root Mean Squared Error en anglais</i>).
RNA	Réseaux de neurones artificiels.
R_S	Résistance de la couche sensible, dépend de l'environnement gazeux
S_i	Sensibilité au gaz i
SO_2	Dioxyde de soufre
S_j	Somme pondérée à l'entrée du $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).
T	Température absolue [K].
t	Temps [s].
T_s	La température des gaz à la sortie de la cheminée [K].
U	Vitesse horizontale moyenne du vent [$m.s^{-1}$].
$U_{j l}$	Sortie du $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).
V_C	Tension de polarisation de la couche sensible
v_d	Vitesse de dépôt sec [$m.s^{-1}$].
V_H	Tension de chauffage
V_{RL}	Tension mesurée aux bornes de la résistance de charge RL
w	vitesse de sortie des gaz [$m.s^{-1}$].
$W_{j l}$	Poids qui relie le $i^{\text{ème}}$ neurone de la couche (l-1) au $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).
x, y, z	Coordonnées cartésiennes [m].
X_b	Cible associée à $b^{\text{ème}}$ observation.
α	Coefficient de dilatation à pression constante.
β	Coefficient dépendant de la classe de stabilité.
γ	Direction du vent.
δ	Terme de source [$\mu g.m^{-3}.s^{-1}$].
ΔH	Sur – hauteur du panache [m].
ΔT	Ecart de température entre l'air et T_s [K].
θ	Température potentielle [K].
λ	Coefficient de lessivage [s^{-1}].
π	Nombre pi.
σ_t	Coefficient de proportionnalité.
σ_y	Ecart-type de la distribution horizontale du nuage [m].
σ_z	Ecart-type de la distribution verticale du nuage [m].
χ	Terme de chimie [$\mu g.m^{-3}.s^{-1}$].
Ψ	flux entrant [$\mu g.m^{-2}.s^{-1}$].
x_r	Entrée du réseau.
x_o	Entrée observée dans le temps.
\bar{O}	Moyenne des observations.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction Générale

Accompagnant un essor industriel de plus en plus impressionnant dans le monde entier, la pollution atmosphérique est devenue ces dernières décennies une préoccupation mondiale majeure. En effet, les rejets gazeux d'origine industrielle sont responsables d'une pollution qui affecte l'environnement et la santé des populations. L'impact de la pollution industrielle sur l'environnement et sur l'homme est loin d'être négligeable. Ceci est particulièrement le cas pour la pollution atmosphérique due aux activités industrielles dont les conséquences sur l'homme et la planète sont des plus alarmants. La diminution des rejets est devenue une priorité dans les sites industriels pour améliorer la qualité de l'air de manière significative et respecter les normes d'émissions imposées par les états. Ainsi, la surveillance permanente de la pollution est indispensable non seulement pour prédire et contrôler les pollutions mais également pour endiguer tout risque d'accident.

Au cours du siècle dernier, le développement des industries chimiques et pétrolières a conduit à une multiplication et une diversification des polluants, Des mesures réglementaires de plus en plus sévères ont alors été adoptées pour limiter les émissions de polluants, en particulier celles d'origines industrielles. Pour satisfaire les demandes de restriction des pouvoirs publics, le monde industriel s'est lancé dans une course aux réductions de leurs émissions de produits nocifs. C'est ainsi qu'au cours des 20 dernières années, l'industrie a fait appel au secteur de la recherche pour développer et optimiser ses méthodes de production, par la mise en place de procédés de plus en plus perfectionnés. Cependant, la réduction des émissions industrielles passe aussi par la surveillance continue des sites et de leurs abords et par l'analyse de scénarii accidentels pour améliorer la compréhension des causes des pics de pollution et prendre les mesures nécessaires pour éviter leurs reproductions futures. Cette approche nécessite alors le développement d'outils de surveillance de la qualité de l'air pour conseiller les autorités, informer et prévenir les populations. En appui de cette surveillance, le monde industriel et scientifique s'est penché sur la problématique de la modélisation de la pollution atmosphérique, afin de renforcer et d'améliorer la sécurité sur et en dehors des sites de production.

La modélisation de la pollution atmosphérique est un problème complexe et pluridisciplinaire. Elle fait appel à la météorologie, à la mécanique ou à la chimie pour déterminer l'évolution de l'espèce polluante de son point de rejet jusqu'à la zone d'étude. La modélisation est utilisée pour diverses applications : le contrôle des émissions, la surveillance des sites et la protection en cas d'accident.

L'étude et la modélisation de la pollution à l'échelle locale du site sont d'autant plus importantes qu'elles permettent aussi d'améliorer la qualité de travail du personnel et

Introduction Générale

d'assurer leur sécurité sur le site de production. De plus, réaliser ces modélisations est aussi un enjeu majeur pour les industriels. Le développement de modèles permettant la surveillance des sites en temps réel et la prévision des pics de pollution sont en plein essor, toujours dans le même but d'allier l'optimisation de la production industrielle et la sécurité.

Au jour d'aujourd'hui, il existe une multitude de modèles, utilisés pour assurer la surveillance spatiale de la pollution atmosphérique. Ces modèles diffèrent généralement par leur concepts théoriques (résolution eulérienne de la dispersion, modèles stochastiques lagrangiens, etc.), par leur complexité (modèles analytiques, simulation directe) et surtout par leurs applications (surveillance de site, prévision, simulation de scénarii, étude d'impact, etc.).

Outre la modélisation permettant la surveillance spatiale, la prédiction (surveillance temporelle) de la pollution atmosphérique revêt une importance capitale particulièrement dans les sites industriels. Dans ce contexte, Nous nous focalisons sur les réseaux de neurones artificiels (RNA) qui font depuis une vingtaine d'années, l'objet de multiples études vu leur capacité à résoudre des problèmes non linéaires et très complexes à entrées et sorties multiples, par simple apprentissage. Ils présentent par ailleurs de nombreux avantages qui font d'eux un outil puissant pour l'approximation des fonctions ainsi que la modélisation des systèmes non linéaires. Cela a motivé des travaux de recherche qui ont montré les capacités de ces réseaux dans le domaine de la prédiction des polluants comparativement aux méthodes d'approximation conventionnelles.

L'objectif de notre travail entre dans le cadre que nous venons de décrire. Notre problématique est de proposer une contribution à la surveillance de la pollution atmosphérique. Nous nous sommes focalisés sur deux directions majeures : la première est représentée par la modélisation de la pollution atmosphérique permettant le suivi spatial des concentrations de polluants atmosphériques en utilisant des méthodes basées sur le modèle de chimie transport. La deuxième direction concerne la prévision temporelle des niveaux de polluants en utilisant trois types de réseaux de neurones artificiels pour identifier le modèle le plus performant permettant de prédire l'évolution de la concentration des polluants dans l'atmosphère à partir d'une base de données obtenue dans le site du complexe GL1K- SKIKDA.

Introduction Générale

La présente thèse est organisée en quatre chapitres comme suit :

Dans le premier chapitre, nous exposerons la pollution atmosphérique et les différents types des polluants et leurs caractéristiques, les différentes sources d'émission ainsi que leurs impacts sur la santé et l'environnement sont également abordés.

Le deuxième chapitre est consacré à la modélisation numérique des nuages de pollution selon le modèle de chimie-transport, et la résolution numérique du modèle de dispersion atmosphérique par le modèle gaussien. L'objectif est de procéder au suivi spatial des concentrations de polluants à partir des données physiques et météorologiques du site cible.

Dans le troisième chapitre, sont présentés de manière détaillée les réseaux de neurones et particulièrement les réseaux de type MLP (multi layer perceptron), NARX (Non linéaire autoregressif exogène) et RBF (Radial basis function). Un état de l'art sur l'exploitation des réseaux de neurones dans le suivi de la pollution atmosphérique et la prédiction des polluants gazeux, est également détaillé dans cette partie.

Le dernier chapitre du manuscrit est consacré à la simulation et à la présentation des résultats. Nous développons l'application des trois réseaux abordés dans le chapitre précédent pour la prédiction des concentrations des polluants CO et NOx dans l'atmosphère du complexe GL1k-Skikda. Par la suite, la comparaison des résultats obtenus est suivie par le choix de la plus performante (RBF) et l'introduction d'une amélioration par optimisation du paramètre h de propagation.

Chapitre I

La pollution atmosphérique

1. Introduction

Les problèmes liés à la pollution atmosphérique sont devenus ces dernières années une préoccupation permanente pour les pouvoirs publics, les scientifiques et même la société civile. La prise de conscience collective de l'impact des différents polluants sur la santé et l'environnement fait petit à petit évoluer les choses dans le sens d'une réduction de cette pollution. Le monde industriel suit cette tendance, au cours de ce premier chapitre, nous allons présenter globalement la problématique de la pollution atmosphérique. Dans cette optique, nous décomposons ce chapitre de la façon suivante :

La première partie est dédiée à la description de la pollution atmosphérique dans les sites industriels, les différentes sources d'émission, les polluants gazeux ainsi que leurs caractéristiques. La deuxième partie est consacrée à la présentation des différents capteurs de gaz et à leur utilisation pour la mesure des polluants gazeux. Finalement nous décrivons les risques industriels liés à la pollution atmosphérique.

2. La pollution atmosphérique

2.1. Définition

De par sa nature complexe, la pollution atmosphérique fait l'objet, suivant les pays et parfois suivant les divers organismes qui en ont la charge dans un même pays, de plusieurs définitions différentes. Certaines reposent sur le principe que toute modification de la composition normale de l'air est une pollution atmosphérique, d'autres y ajoutent des notions de gênes ou de nocivité dues aux composés anormaux qui ont modifié cette composition. De même, la présence de polluants d'origine naturelle (volcans, érosion,...) peut, selon certains organismes être considérée comme une pollution atmosphérique tandis que d'autres préfèrent ne parler que de polluants liés à l'activité humaine [1, 2].

2.2. Historique

Depuis le 19^{ème} siècle, certaines zones urbaines industrialisées dans le monde ont connu de graves problèmes de pollution atmosphérique, les émissions en cause dans la plupart des villes étaient principalement celles de soufre et les fumées noires, dues à l'utilisation du charbon dans les maisons et les industries. La pollution de l'air a toujours existé si l'on considère les émissions d'origine naturelle. Par exemple, le volcanisme émet depuis les origines du monde des gaz et des particules solides, modifiant la composition de l'air

atmosphérique. La perception par nos sens (la vue, l'odorat) de la qualité de l'air, la facilité d'accès à l'information, et les éléments intellectuels issus des informations reçues par le biais des médias rendent le public beaucoup plus conscient aujourd'hui qu'hier des enjeux de la pollution. Ainsi malgré une relative baisse des émissions de polluants, le public considère que la pollution atmosphérique n'a jamais été aussi mauvaise et problématique, les grandes agglomérations craignent d'être asphyxiées par l'automobile [3].

2.3. Les sources de pollution atmosphérique

Les sources de pollution sont soit d'origine naturelle, soit d'origine anthropique et peuvent être de différentes natures suivant la manière dont elles polluent l'atmosphère. Les rejets de polluants peuvent être accidentels lorsque la source émet de manière violente et instantanée, entraînant alors des conséquences dramatiques et souvent mortelles (accidents de Seveso, Bhopal,...) ou chroniques lorsque les émissions de polluants sont de moindre quantité mais répétées. Dans ce cas, les conséquences sont moins immédiates et spectaculaires que pour un rejet accidentel, mais l'impact sur l'environnement et la société est loin d'être négligeable. Les principales sources de pollution atmosphérique sont les suivantes:

2.3.1. Les émissions naturelles

Certains polluants atmosphériques sont d'origine naturelle. Ce sont essentiellement le dioxyde de soufre (SO_2) et le dioxyde d'azote (NO_2). Ces composés proviennent principalement des éruptions volcaniques, des décompositions organiques, des feux de forêt, ainsi que des océans. Des particules en suspension sont également présentes dans l'atmosphère du fait du volcanisme, du transport de poussières en provenance des déserts (le Sahara par exemple) ou de l'érosion éolienne des sols. On peut aussi citer dans les sources naturelles de pollution les végétaux, dont le cycle de vie produit de nombreux composés toxiques (H_2S , CH_4 , COV) ou allergisants tel que le pollen. Finalement, le radon, gaz radioactif issu de la chaîne de désintégration radioactive de l'uranium présent dans certains sols et roches, représente également une forte source de pollution à l'intérieur des habitations.

2.3.2. Les émissions d'origine agricole

Le développement de l'agriculture intensive contribue à la pollution atmosphérique. Ses émissions (essentiellement l'ammoniac, le méthane, le protoxyde d'azote, le monoxyde de carbone et les pesticides) sont liées à la décomposition des matières organiques, aux animaux d'élevage et à l'utilisation massive d'engrais et de pesticides ;

2.3.3. Les émissions industrielles

L'industrie est à l'origine des émissions spécifiques dues aux processus de traitement ou de fabrication employés. En quantités variables, selon les secteurs industriels, elle est émettrice de monoxyde et de dioxyde de carbone, de dioxyde de soufre, d'oxyde d'azote, de poussières, de composés organiques volatils (COV), etc. Les secteurs qui rejettent les quantités les plus importantes sont la production d'énergie (centrales thermiques), les industries chimique, pétrolière et métallurgique, les incinérateurs d'ordures ménagères. L'industrie est également à l'origine de la majeure partie des rejets accidentels ;

2.3.4. Les émissions domestiques

Au niveau individuel ou tertiaire (chauffage des logements ou des bureaux), la combustion de combustibles fossiles (charbon, fioul lourd, etc.) produit d'importantes émissions polluantes. Le dioxyde de carbone (CO₂), produit inévitable de la combustion de matières organiques et dont la concentration croissante dans l'atmosphère contribue à l'effet de serre, le monoxyde de carbone (CO), le dioxyde de soufre (SO₂), les oxydes d'azotes (NO_x), les poussières, les métaux lourds, etc. sont concernés ;

2.3.5. Les émissions dues aux transports

La pollution due aux transports a longtemps été considérée comme un problème de proximité, essentiellement perçu dans les villes en raison de la densité du trafic. Aujourd'hui, on sait que les transports, essentiellement routiers et en particulier l'automobile, sont une source de pollution importante. Les moteurs à explosion sont ainsi de très loin la première cause d'émission d'oxydes d'azote et de divers hydrocarbures. Les moteurs diesels, moins polluants pour ce qui concerne ce dernier type d'émissions, sont en revanche à l'origine de particules et de dioxyde de soufre.

La contribution des transports à la pollution ne cesse de s'accroître du fait de l'augmentation du trafic directement liée à l'activité économique.

2.3.6. Les émissions dues aux traitements des déchets

Ils sont à l'origine de plusieurs types de polluants, parmi lesquels : le méthane (abondamment dégagé par la décomposition des matières organiques, il contribue fortement à l'effet de serre), l'acide chlorhydrique, les métaux lourds, les dioxines et les furanes qui sont produits par l'incinération des déchets industriels et ménagers [4].

2.4. Problématique de la pollution industrielle

Les polluants d'origine industrielle sont responsables d'une pollution de proximité qui affecte la santé des populations lors des pics de pollution, mais participe aussi à la dégradation du patrimoine bâti et entraîne le plus souvent des nuisances olfactives. A l'échelle régionale, le transport et la transformation des substances oxydantes sont à l'origine des pluies acides. L'émission de substances précurseurs de la pollution photochimique (oxydes d'azote, composés organiques, monoxyde de carbone) est également imputable en partie aux activités industrielles. Enfin comme d'autres activités humaines, l'industrie participe à l'effet de serre.

Ainsi l'impact de la pollution industrielle sur l'environnement et plus précisément sur la pollution de l'air est loin d'être négligeable et la diminution des rejets est devenue depuis quelques années une priorité pour tous les pays qui souhaitent améliorer la qualité de l'air de manière significative en imposant des normes d'émissions aux industriels pour les principaux polluants.

2.5. Les principaux polluants :

Les principaux polluants de l'atmosphère issus de l'industrie sont :

2.5.1. Les polluants primaires :

Les polluants peuvent être classés comme primaires ou secondaires. Par définition, les polluants primaires sont ceux qui proviennent directement d'une source polluante identifiée, tels que le monoxyde de carbone provenant des processus de combustion et présent dans les gaz d'échappement des voitures, le dioxyde de soufre provenant de l'industrie... Les polluants secondaires ne sont pas émis directement par des sources connues et identifiées. Au contraire, ils se forment dans l'air à la suite de réactions mettant en jeu les composés émis par les sources primaires, notamment lors d'épisodes météorologiques particuliers.

Un exemple majeur de polluant secondaire est l'ozone troposphérique, un des nombreux polluants secondaires qui forment le smog photochimique, mais on peut citer

aussi les NPA (nitrates de peroxyacétyle) ou encore les COV (composé organiques volatiles) dits «COV secondaires » [5].

2.5.1.1. Les oxydes d'azote (NO_x) :

Les (NO_x) regroupent deux espèces : le monoxyde d'azote (NO) et le dioxyde d'azote (NO₂). La majorité des NO_x est émise sous forme de NO, lequel est transformé rapidement en NO₂ par des processus chimiques. Le NO est formé par combinaison de l'azote (N₂) et de l'oxygène (O₂) lors de processus qui nécessitent de hautes températures (combustion, éclairs). Le temps de vie des NO_x est de l'ordre de la journée [6].

2.5.1.2. Les Composés Organiques Volatils (COV) :

Les COV regroupent une large diversité d'espèces. Les COV sont définis comme "tout composé organique ayant à 293,15 °K une pression de vapeur de 0,01 kPa ou plus". Ces espèces sont formées d'atomes d'hydrogène et de carbone. Les atomes d'hydrogène peuvent être substitués par des atomes tels que les halogènes, l'oxygène, le soufre, l'azote ou le phosphore. Le tableau I.1 présente les temps de vie de certains COV. Le temps de vie chimique des COV, et donc leur temps de résidence dans l'atmosphère, est extrêmement variable, allant de quelques heures à plusieurs jours [6].

Tableau I-1 : les temps de vie de certains COV. [6]

Composé	Temps de vie (1)	Composé	Temps de vie (1)
<i>Alcanes</i>		<i>Alcènes</i>	
variables Ethan	28 jours	Ethène	20 h
Propane	9 jours	Propène	6h30
Iso-butane	3 jours	1-butène	5h30
Butane	3 jours	Cis-2-butène	3h
Iso-pentane	2 jours	1,3-butadiène	2,6h
Hexane	1 jour	<i>Aromatiques</i>	
2-methylpentane	1,3 jour	Benzène	6 jours
Nonane	17 h	Toluène	1,2 jour
Decane	15 h	éthylbenzène	1 jour
<i>Alcynes</i>		o-xylène	13 h
Acétylène	8 jours	m-xylène	7 h
		p-xylène	12 h
		1,2,3-trimethyl-benzène	5,3 h
		1,3,5-trimethyl-benzene	2 h

2.5.1.3. Le dioxyde de soufre (SO₂) :

Le dioxyde de soufre a pour origine principale la combustion des énergies fossiles (fioul, charbon) qui libère du soufre. Les principales sources de SO₂ sont donc les installations de chauffage industriel, les raffineries de pétrole ainsi que certains procédés de fabrication.

2.5.1.4. Le monoxyde de carbone (CO) :

Le monoxyde de carbone est formé par la combustion incomplète du carbone et provient essentiellement des moteurs des véhicules et des installations de combustion mal réglées [4].

2.5.1.5. Les particules en suspension :

Ces particules (notées « PM » en anglais pour « *Particulate Matter*») sont d'une manière générale les fines particules solides ou liquides en suspension dans l'air. Ces particules sont définies dans la directive 1999/30/CE comme « les particules passant dans un orifice d'entrée calibré avec un rendement de séparation de 50% pour un diamètre aérodynamique de 10 µm (cas des PM₁₀) ou de 2,5 µm (cas des PM_{2,5}) ». Ces particules proviennent de sources naturelles comme les éruptions volcaniques, la végétation (pollens...), les incendies de forêts... ou de sources anthropiques comme les émissions industrielles, la combustion des fossiles combustibles... On distingue 4 types de particules:

- **PM₁₀** particules en suspension dans l'air, d'un diamètre aérodynamique (ou diamètre aéraulique) inférieur à 10 µm ;
- **PM_{2,5}** dont le diamètre est inférieur à 2,5 µm, appelées « particules fines » ;
- **PM₁** dont le diamètre est inférieur à 1,0 µm, appelées « particules très fines » ;
- **PM_{0,1}** dont le diamètre est inférieur à 0,1 µm, appelées « particules ultrafines » ou nanoparticules.

Toutes ces particules sont dangereuses tant pour la santé des êtres humains, que pour la végétation. Par contre, seules les particules PM₁₀ et PM_{2.5} sont réglementées et ciblées par les Directives internationales. L'augmentation des concentrations en particules dans l'air est corrélée avec l'augmentation des maladies cardiovasculaires, des allergies, des cancers du poumon, ce qui conduit à une diminution de l'espérance de vie [7].

2.5.1.6. Le Méthane :

Ce gaz n'est pas réglementé en tant que polluant dans l'atmosphère par les Directives internationales, mais peut être un bon traceur de certaines pollutions anthropiques. On le trouve à l'état naturel produit par des organismes vivants. Il constitue

l'essentiel du gaz naturel qui est exploité comme combustible fossile. Il est l'un des principaux gaz à effet de serre et a un rôle important dans le réchauffement climatique. Depuis l'ère industrielle, la concentration de méthane n'a cessé d'augmenter dans l'atmosphère. Elle est passée de 700 ppbv au début du 19^{ème} siècle à 1750 ppbv dans les années 2000 en raison de l'augmentation des activités humaines liées à l'industrialisation et à l'urbanisation (figure I-1).

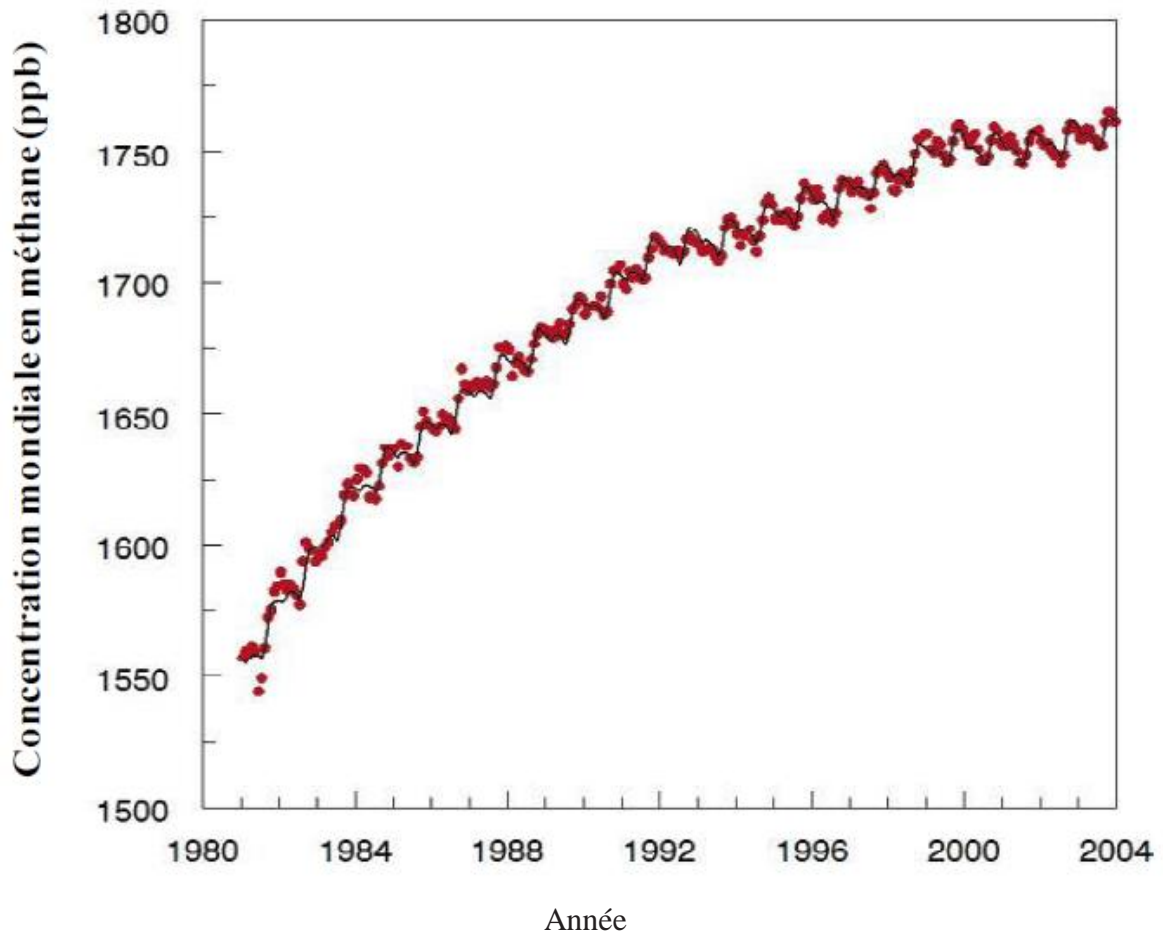


Figure I-1 : Augmentation de la concentration du méthane dans le monde [8].

2.5.2. Les polluants secondaires :

Ce sont les polluants présents dans l'atmosphère qui se forment à la suite de réactions mettant en jeu les composés émis par des sources primaires ou encore qui ne proviennent pas d'une source directement polluante. Leur présence dans l'atmosphère est difficile à réguler car leur existence ne provient pas directement des activités anthropiques.

- **L'Ozone** : Dans la basse atmosphère et sous des conditions climatiques particulières (comme une augmentation de l'irradiation solaire), en zone urbaine, les émissions de précurseurs sont importantes : les hydrocarbures et les oxydes d'azote sont donc présents en grande quantité. Beaucoup d'ozone se formera mais,

celui-ci réagira très vite, une fois formé, avec le monoxyde d'azote dont l'apport est constant. L'ozone sera donc en partie consommé au niveau des agglomérations et généralement présent en faible quantité.

Comme pour tous les polluants secondaires, il est difficile de limiter la production d'ozone à partir de la mise en œuvre de limitations des émissions. Bien que la concentration globale des autres polluants dans l'atmosphère tende à baisser, celle de l'ozone reste intacte ou parfois subît de légères augmentations au cours des dernières années. C'est dans les zones rurales proches des agglomérations que les concentrations en O_3 enregistrées sont généralement les plus élevées. Ces concentrations plus élevées s'expliquent par la cinétique de la formation de ce polluant secondaire lors du vieillissement de la masse d'air considérée, transportée à partir des zones urbaines ou industrielles fortement émettrices en espèces primaires. Par ailleurs, dans les sites trafic, l' O_3 étant détruite par certains polluants primaires il est généralement absent sur ces sites très pollués. Pour toutes ces raisons, l' O_3 est considéré comme le traceur majeur de la pollution photochimique. Tous les polluants cités précédemment présentent des concentrations variables dans l'atmosphère et contribuent d'une façon directe ou indirecte à la pollution atmosphérique [9].

- Les principaux polluants atmosphériques se classent dans deux grandes familles bien distinctes : les polluants primaires (SO_2 , PS, NO_x , COV, CO) et les polluants secondaires (O_3). Les polluants primaires sont directement issus des sources de pollution alors que les polluants secondaires résultent des phénomènes de dispersion et de transformations photochimiques dans l'environnement.
- En hiver, la pollution atmosphérique est essentiellement due aux polluants primaires. En été, elle est beaucoup plus intense avec un mélange de polluants, différent de celui d'hiver. Les polluants secondaires dits photo-oxydants se forment par action du rayonnement solaire sur les polluants précurseurs que sont principalement le dioxyde d'azote NO_2 et les composés organiques volatils COV.
- Les polluants primaires et secondaires sont plus ou moins nuisibles à la santé humaine, selon leur concentration dans l'air, et à la sensibilité de l'individu. Par conséquent, les législations nationales et internationales existent afin de réguler et contrôler la quantité de pollution émise dans l'atmosphère, et afin de s'assurer que les objectifs pour améliorer la qualité ambiante de l'air soient atteints [10].

2.6. La surveillance de la qualité de l'air :

➤ La qualité de l'air :

La qualité de l'air dépend de la concentration des différents polluants dans l'atmosphère à l'échelle locale. Quatre polluants sont pris comme indicateurs (ozone, dioxyde d'azote, dioxyde de soufre, ainsi que les poussières : PM₁₀ et PM_{2,5} –poussière d'un diamètre supérieur respectivement à 10 et 2,5 µm-) [11].

La surveillance de la qualité de l'air concerne les substances suivantes :

- . Le dioxyde d'azote ;
- . Le dioxyde de soufre ;
- . L'ozone ;
- . Les particules fines en suspension ;

La surveillance de la qualité de l'air est confiée à l'observatoire national de l'environnement et du développement durable.

2.7. Indices de la qualité de l'air

2.7.1. Indices de la qualité de l'air mondiale

Tableau I-2 : Valeurs guides de l'Organisation Mondiale de la Santé OMS pour les polluants classiques de la qualité de l'air extérieur [12].

Polluant	Valeur guide (µg/m ³)	Durée d'exposition
SO ₂	500	10mn
	20	24 heures
	50	1 an
NO ₂	200	1 heure
	40	1 an
O ₃	160 (seuil d'information)	1 heure
	240 (seuil d'alerte)	1 heure
	100	8 heures
PM ₁₀	50	24 heures
	20	1 an
PM _{2,5}	25	24 heures
	10	1 an

2.7.2. Indices de qualité de l'air européen

Tableau I-3 : Selon la définition de l'Agence européenne pour l'environnement (AEE) [13].

polluants	1 très bon	2 : Bon	3 : Moyen	4 : Mauvais	5 : Très Mauvais
O ₃ (µg/m ³)	0-80	80-120	120-180	180-240	240-600
NO ₂ (µg/m ³)	0-40	40-100	100-200	200-400	400-1000
SO ₂ (µg/m ³)	0-100	100-200	200-350	350-500	500-1250
PM ₁₀ (µg/m ³)	0-20	20-35	35-50	50-100	100-1200
PM _{2,5} (µg/m ³)	0-10	10-20	20-25	25-50	50-800

2.7.3. Indices de qualité de l'air algérien : Elle s'effectue selon les modalités techniques fixées par décret exécutif n° 06-03 (Journal officiel de la république algérienne N° 01. 7 janvier 2006).

Tableau I-4 : Indices de qualité de l'air algérien d'une base moyenne annuelle :

Polluants	NO ₂ (µg/Nm ³)	SO ₂ (µg/Nm ³)	O ₃ (µg/Nm ³)	PM ₁₀ (µg/Nm ³)
objectif de qualité	135	150	110	50
valeur limite	200	350	200	80
seuil d'information	400	350	180	Selon les caractéristiques physiques et chimiques des particules concernées.
seuil d'alerte	600	600	360	

* **Objectifs de qualité :** Un niveau de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère, fixé sur la base de connaissances scientifiques, dans le but d'éviter, de prévenir ou de réduire les effets nocifs de ces substances sur la santé humaine ou sur l'environnement, à atteindre dans une période donnée.

* **Valeur limite :** Un niveau maximal de concentration de substances polluantes dans l'atmosphère, fixé sur la base de connaissances scientifiques.

* **Seuil d'information :** Un niveau de concentration des substances polluantes dans l'atmosphère au-delà duquel une exposition de courte durée a des effets limités et transitoires sur la santé de catégories de la population particulièrement sensibles.

* **Seuil d'alerte :** Un niveau de concentration des substances polluantes dans l'atmosphère au-delà duquel une exposition de courte durée présente un risque pour la santé humaine ou pour l'environnement [14].

3. Les capteurs de gaz

Les méthodes normalisées de mesure de la pollution atmosphérique déjà citées nécessitent des instruments de mesure très sophistiqués et complexes, ce qui les rend généralement surdimensionnés dans des applications où la précision des mesures et la détermination sélective de toutes les espèces gazeuses présentes dans une atmosphère polluée n'est pas une priorité ; c'est le cas du suivi qualitatif de la qualité de l'air. Dans cette optique, les recherches relativement récentes en matière de métrologie de la qualité de l'air se sont intéressées à l'utilisation de capteurs de gaz basés sur des concepts physiques ou physicochimiques offrant des méthodes de mesure plus simples et une plus grande souplesse d'utilisation. Les progrès technologiques de la microélectronique et l'élaboration de nouveaux matériaux sensibles utilisés dans l'élaboration de ces capteurs de gaz sont à l'origine des avancées majeures dans ce domaine. Ils sont généralement constitués d'un matériau dont l'une ou plusieurs de ses caractéristiques physiques sera sensible à la nature de l'environnement gazeux auquel il est soumis. Une modification de l'environnement sera alors généralement traduite en une variation de signal électrique aux bornes du matériau. Dans cette optique, ces capteurs doivent être capables de présenter une sensibilité, une fiabilité et une sélectivité acceptables selon les exigences des applications visées. Ces paramètres sont primordiaux dans des dispositifs contenant plusieurs capteurs de gaz comme les réseaux des capteurs de gaz et les nez électroniques. Dans cette partie, sont présentés les différents types des capteurs de gaz, en indiquant leurs avantages et inconvénients et en terminant sur leurs utilisations dans les réseaux de capteurs [9].

3.1. Schématisation du capteur :

De façon générale, un capteur de gaz à l'état solide est un dispositif, constitué d'une couche sensible, qui sert d'interface avec le gaz à détecter, et d'un transducteur, qui transforme une grandeur physique en une autre (le plus souvent un signal électrique), qui est ensuite traitée et exploitée en aval par un opérateur ou ordinateur. L'architecture générale est représentée schématiquement à la Figure I-2

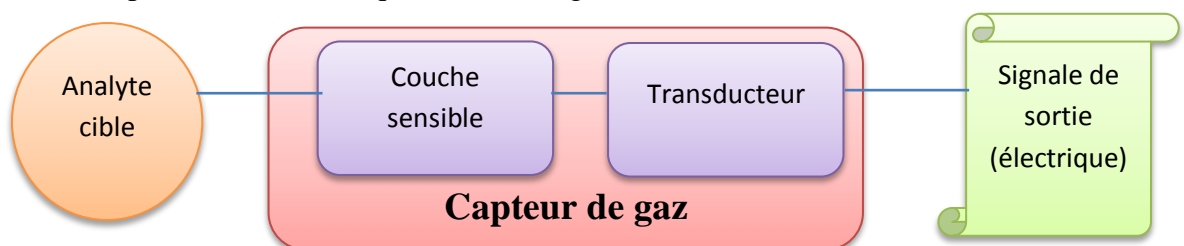


Figure I-2 : Schéma de principe d'un capteur de gaz

Détaillons chacun des éléments de cette représentation :

- L'**Analyte cible (X)** : il peut être un gaz pur, un mélange complexe de gaz ou un élément de ce mélange.
- Le **Capteur de gaz** est composé de :
 - Une **Couche Sensible(S)** : c'est l'élément physique ou chimique qui va interagir avec l'analyte pour faire varier une grandeur physique ou chimique de cette couche.
Le mécanisme de détection peut être très varié et c'est lui qui conditionne les spécificités du capteur. La couche sensible n'est pas forcément matérielle et peut être une onde électromagnétique, mécanique aussi bien qu'un composé chimique ou une interface fonctionnalisée ou non.
 - Un **Transducteur** : c'est l'élément qui permet de transformer la grandeur physique ou chimique captée par la couche sensible en une grandeur physique, le plus souvent en un signal électrique. Ce signal peut ensuite être traité ou interprété par un opérateur ou un système de traitement du signal.
En aval de ce transducteur, on peut trouver des dispositifs de conditionnement du signal, qu'ils soient analogiques ou numériques assurant l'acquisition, l'amplification et le traitement du signal [15].

La Figure I-3 illustre une chaîne complète d'un système de détection chimique (détection de molécules en phase gazeuse ou liquide). Cette chaîne de mesure comprend un premier maillon constitué d'un ou plusieurs capteurs suivi d'un système de traitement de l'information issue du (ou des) capteur(s). Le capteur chimique est un dispositif qui transforme une information chimique, comme la concentration ou la composition d'un échantillon à analyser, en un signal exploitable (électrique ou optique). L'information chimique peut naître d'une réaction chimique de l'échantillon analysé ou d'une propriété physique du système étudié.

Un capteur chimique n'est pas un système autonome mais représente une des composantes essentielles d'un analyseur. D'autres parties comme le transport de l'échantillon analysé au capteur, le conditionnement de l'échantillon, le traitement du signal issu du capteur, ... peuvent compléter le capteur chimique en fonction du cahier des charges de l'application.

En effet, suivant les cas, certains éléments peuvent ne pas être nécessaires comme les parties 2 et 3 de mise en forme de l'échantillon avant réception ou encore la partie 8 pour la reconnaissance de forme.

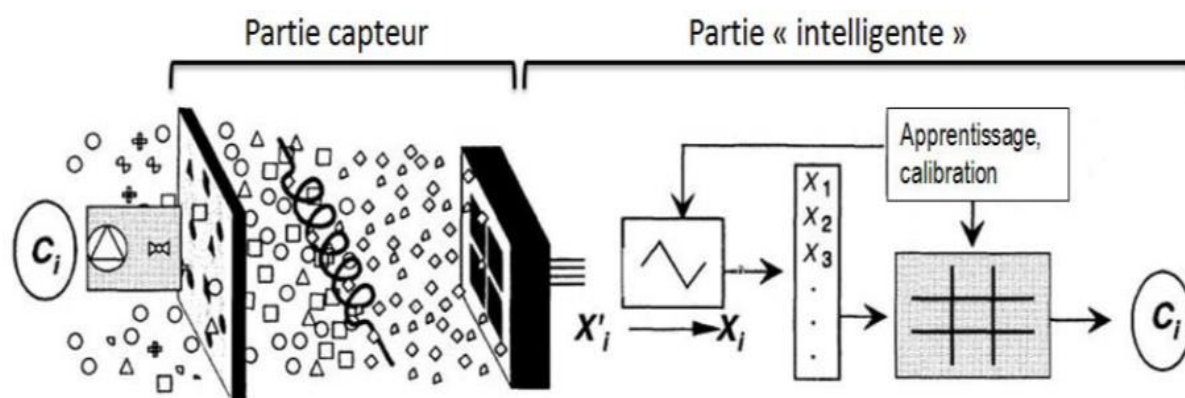


Figure I-3 : Rôle d'un capteur chimique dans une chaîne complète [16].

La partie détection d'un tel système peut être composée de deux parties essentielles. La première concerne la réception ou « transduction primaire » : il s'agit de la conversion de l'information chimique en une information physique ou électrique. Dans le premier cas, il s'agit typiquement des capteurs basés sur les mesures d'absorbance, de l'indice de réfraction, de la modification de masse, Dans le deuxième cas, il s'agit d'une modification des caractéristiques électriques du capteur (charges, impédance, permittivité) suite à une réaction chimique. On appelle « transduction », le principe utilisé pour effectuer une de ces transformations. Les principes de transduction d'un capteur chimique sont très nombreux : optique, électrochimique, électrique, massique, thermoélectrique, ... [17]

La deuxième partie est le « conditionnement », c'est-à-dire le circuit incluant la cellule sensible pour obtenir un signal utile et exploitable, image de l'information physique ou électrique. Nous pouvons appeler cela la « transduction secondaire ». D'un point de vue système, et de manière très basique, le capteur peut donc se modéliser par l'association en cascade de ces deux transductions.

3.2. Les principales caractéristiques des capteurs de Gaz

Les performances d'un capteur de gaz s'évaluent grâce à ses six principales caractéristiques : les 3 « S » : Sensibilité, Sélectivité et Stabilité mais aussi la réversibilité, le temps de réponse et la reproductibilité. Ce sont ces performances que nous tentons de caractériser tout au long de notre étude même si les 3 « S » seront toujours les plus importantes dans un premier temps.

3.2.1. Sensibilité :

La sensibilité est un paramètre qui exprime la variation de la réponse du capteur en fonction de la variation du mesurande (concentration de gaz). Un capteur de gaz est dit sensible si une petite variation de concentration entraîne une importante variation du signal de sortie.

La définition générale de la sensibilité est donc :

$$S_i = \frac{\Delta R}{\Delta [C]_i} \quad (\text{I.1})$$

Avec S_i , la sensibilité au gaz i

R , la réponse du capteur (la sortie du capteur, résistance ou conductance, ...)

$[C]_i$, la concentration du gaz i

La réponse des capteurs de gaz est généralement fortement non linéaire, la sensibilité n'est donc pas constante. Pour pouvoir comparer les sensibilités de capteurs très différents, des calculs différentiels et relatifs sont utilisées comme « Réponse relative » :

Calcul différentiel relatif :

$$r_{relative} = \frac{R_{référence} - R_{gaz}}{R_{référence}} \quad \text{Ou} \quad r_{relative} = \frac{R_{référence} - R_{gaz}}{R_{gaz}} \quad (\text{I.2})$$

Calcul relatif :

$$r_{relative} = \frac{R_{gaz}}{R_{référence}} \quad \text{Ou} \quad r_{relative} = \frac{R_{référence}}{R_{gaz}} \quad (\text{I.3})$$

Avec $r_{relative}$: réponse relative du capteur.

$R_{référence}$ Peut-être la valeur de résistance sous ambiance neutre (en général l'air) ou bien à une valeur de concentration du gaz cible donnée.

R_{gaz} Correspond à la valeur de la résistance sous une concentration du gaz donné.

Ces calculs relatifs donnent une image de la sensibilité au point de les confondre puisque bon nombres d'auteurs parlent de sensibilité avec la réponse relative.

3.2.2. Sélectivité :

Elle est définie généralement comme le rapport de la sensibilité d'un gaz sur la sensibilité d'un autre gaz pour des concentrations données. Un capteur est sélectif si sa sensibilité à un gaz est très peu affectée par la présence d'autres gaz (dits interférents).

3.2.3. Stabilité :

Un capteur est dit stable quand, pour des conditions fixes, il fournit une valeur de ligne de base constante. Autrement dit, la notion de manque de stabilité est associée aux dérives du capteur au cours du temps. Il y a la dérive de « l'offset » (dérive de réponse sous air ou gaz référent constant) et la dérive de la sensibilité à un gaz donné. Cette dérive peut provenir aussi bien du capteur lui-même (problème de réversibilité) que des conditions ambiantes à laquelle est réalisée l'expérience [18].

3.2.4. Réversibilité :

Elle définit la capacité du capteur à revenir à son état initial lorsqu'on supprime l'excitation gazeuse. Dans ce cas, nous devons, dans toutes nos expériences, vérifier cette réversibilité car dans le cas contraire nous parlons d'empoisonnement du capteur.

3.2.5. Temps de réponse et de recouvrement :

Il s'agit de quantifier le temps que met le capteur à réagir à un événement (temps de réponse) et le temps mis pour revenir dans la configuration initiale une fois l'évènement disparu (temps de recouvrement).

Dans le cas d'un changement du milieu ambiant, le temps de stabilisation du système sera aussi fonction du volume de l'enceinte de mesure et du débit (si mesure en flux dynamique).

Il est à noter qu'il est souvent très difficile d'estimer ce temps sans prendre en compte celui du système de mesure complet (ou banc de test) qui peut être soit plus petit, soit équivalent, soit bien plus important suivant les conditions de mesure [19].

3.2.6. Reproductibilité :

La reproductibilité d'un capteur de gaz traduit sa capacité à produire la même réponse pour une même atmosphère gazeuse. Le système est reproductible s'il répond à un gaz de la même façon quels que soient le nombre de mesures et le temps entre les mesures. La reproductibilité comprend le temps de réponse (et de recouvrement) et surtout la sensibilité.

Par ailleurs, il existe la notion de reproductibilité technologique de capteur à capteur. Il s'agit de pouvoir fabriquer deux capteurs ayant les mêmes caractéristiques physiques et géométriques. Dans le cas d'intégration de couches sensibles, la notion de reproductibilité de ces couches est particulièrement importante et constitue même un verrou qui affecte intrinsèquement la reproductibilité de la réponse.

Chacune de ces performances sont bien entendu plus ou moins prépondérantes suivant les applications : une application (comme la qualité de l'air dans l'habitacle d'une voiture) privilégiera plutôt le temps de réponse et la reproductibilité plutôt que le seuil bas de détection) alors qu'une autre application (comme l'environnement ou la santé) sera plus regardante sur le seuil bas de détection). Dans ces cas, la miniaturisation du capteur n'est pas forcément une priorité contrairement à une application de textile instrumenté. Cela montre qu'il est quasi impossible de concevoir un capteur générique [19].

3.3. Utilisation des capteurs dans la qualité de l'air

Comme chaque type de capteurs de gaz présente aussi bien des avantages que des inconvénients, il s'agira de trouver le meilleur compromis répondant aux contraintes imposées par le cadre du suivi de la qualité de l'air. Les capteurs idéaux doivent combiner facilité d'utilisation, bas coût, et temps de réponse rapide, tout en offrant une sensibilité et une sélectivité acceptables. Le tableau I-5 répertorie les différents types de capteurs de gaz les plus utilisés, en rappelant brièvement leur principe de détection, leurs points forts et leurs faiblesses.

Dans le cadre du suivi de la pollution de l'air et de la construction d'un système portable à base de réseaux de capteurs, nous cherchons des capteurs ayant une bonne sensibilité avec un temps de réponse rapide, miniatures et faciles à utiliser et à implémenter dans des systèmes multi-capteurs, et de faibles coût et consommation électrique. Une lecture approfondie de ce tableau montre que les capteurs de gaz à semi-conducteurs (s-c) combinent l'ensemble des performances ciblées, et présentent surtout les limites de détection les plus basses. Par conséquent, ils constituent le meilleur choix pour une utilisation dans un système multi-capteurs pour le suivi de la pollution atmosphérique.

Tableau I-5 : Classification de quelques types de capteurs de gaz selon leur principe de détection [20].

Type de Capteur	Grandeur mesurée	Limite de détection
Electrolyte solide	Tension ou courant	10-20 ppm
Capacitif	Capacité	~10 ppb
Résistif – semi-conducteur	Résistance ; Conductance	10 ppb à 1 ppm
PID	Charge électrique	~100 ppm
Optique	Pic d'absorption	~100 ppm
Conductimétriques	Conductivité thermique	

4. Les risques industriels liés à la pollution atmosphérique :

Selon la dernière synthèse de l'évaluation des risques liés à la pollution atmosphérique réalisée par l'Organisation mondiale de la santé, « les données sur les polluants dans l'air et leurs effets sur la santé publique sont uniformes et montrent des effets indésirables sur la santé aux expositions auxquelles les populations urbaines sont actuellement soumises dans les pays développés comme dans les pays en développement.

L'éventail des effets sur la santé est large, mais ce sont surtout les systèmes respiratoires et cardio-vasculaires qui sont affectés. L'ensemble de la population est touchée, mais la sensibilité à la pollution peut montrer des variations selon l'état de santé et l'âge. Le risque augmente sans cesse pour diverses pathologies et rien ne permet de penser qu'il existe un seuil au-dessous duquel on pourrait s'attendre à ce qu'il n'y ait aucun effet indésirable pour la santé [21].

Le XX^{ème} siècle marque réellement un tournant dans le domaine de la chimie atmosphérique et les problématiques sont de plus en plus nombreuses à voir le jour : trou dans la couche d'ozone, smog, photochimie, pollution particulaire, composition de l'atmosphère, effet de serre, conséquences sur le climat ... Jusque dans les années 1950, la pollution atmosphérique restait un problème à l'échelle locale : les « victimes » étaient les personnes vivant à proximité d'émissions industrielles. La destruction des forêts, des Monts Métallifères en Allemagne notamment dans les années 1980, a révélé la nécessité de considérer la pollution comme un phénomène transfrontalier, et non pas seulement local, et impliqué une prise de conscience internationale : la pollution atmosphérique est devenue un phénomène global. Les pollueurs sont devenus mobiles avec le développement du transport (routier, maritime...) et les parts de l'agriculture et des activités domestiques (chauffage) se sont ajoutées aux activités industrielles. Les dégâts deviennent diffus, tout comme les sources de pollution [22].

4.1. Les risques sur l'Environnement et la santé

Dans un premier temps, l'étude des impacts sur l'Environnement a principalement concerné les végétaux. Dès le XIX^{ème} siècle, les pluies acides à proximité d'usines métallurgiques ont entraîné la destruction des feuilles mais aussi d'arbres et de forêts entières et focalisé l'intérêt de la communauté scientifique sur ces phénomènes. Au fur et à mesure des avancées scientifiques et de l'évolution permanente des méthodes de mesure des concentrations en polluants atmosphériques et de leurs effets, l'intérêt s'est porté sur des phénomènes globaux, de l'échelle de l'écosystème à celle de la planète.

La santé humaine a toujours été un des sujets de recherche, tant du point de vue des sciences « dures » que du point de vue purement médical. Les effets des principaux polluants concernés par les réglementations en vigueur sont décrits succinctement. Et le tableau I-6 présente Les risques pour l'Environnement et les risques pour l'homme des Principaux polluants, et leurs Concentrations courantes [22].

Tableau I-6 : Les risques pour l'Environnement et les risques pour l'homme des Principaux polluants. [7,22]

Principaux polluants atmosphériques	Concentrations courantes	Risques pour l'Environnement	Risques pour l'homme
SO₂	site rural : 5 à 15 µg/m ³ site urbain : 65 à 85 µg/m ³	pluies acides, pollution acido-particulaire	Très soluble, rapidement absorbé par les surfaces humides de la bouche, du nez. Irritant respiratoire, contribue à l'exacerbation des troubles bronchiques.
NO_x (NO et NO ₂)	site rural : 15 à 30 µg/m ³ site urbain : 50 à 80 µg/m ³	précurseur d'ozone troposphérique, pluies acides, dérive de l'effet de serre, destruction de la couche d'ozone, eutrophisation	Irritations de l'appareil respiratoire, crises d'asthme et bronchiolite.
CO	site urbain : < 20 mg/m ³ site rural : < 0,23 mg/m ³	précurseur d'ozone troposphérique	Atteinte du système nerveux central et des organes sensoriels.
O₃	site de fond : 60 à 100 µg/m ³ en moyenne	phytotoxique	Polluant irritant des yeux, de la gorge, et des poumons, peut altérer la fonction respiratoire et la résistance aux infections.
COV-NM	Variables selon les composés	Variable selon les composés	Irritant des yeux et des poumons peuvent engendrer des bronchites par intoxication chronique. A long terme, ils seraient responsables de cancers.
PM₁₀ et PM_{2.5}	site rural : 25 à 40 µg/m ³ site urbain : 40 à 60 µg/m ³	impact sur le climat et sur la chimie hétérogène	Irritant très actif par altération des fonctions respiratoires, crises d'asthme avec à long terme des bronchites chroniques.

Parmi les polluants cités, on retrouve certains gaz à effet de serre (ozone, dioxyde de carbone, protoxyde d'azote) caractérisés par leur capacité d'absorption du rayonnement infrarouge émis par la Terre, des gaz réactifs (monoxyde de carbone, composés organiques volatils, dioxyde de soufre, oxydes d'azote) qui participent à la formation d'ozone troposphérique et de composés acides et enfin, un gaz oxydant (O₃) qui est à l'origine de la

formation primaire des radicaux hydroxyles (OH) et prend part dans les processus d'oxydation. Les impacts des particules en suspension de diamètre aérodynamique inférieur

à 10 μm et 2,5 μm (PM₁₀; PM_{2,5}).

Les impacts de ces diverses familles de polluants atmosphériques varient selon des échelles de temps et d'espace :

- A l'échelle locale, correspondant à quelques heures de résidence dans le milieu atmosphérique, les polluants vont avoir un impact sur la santé et sur les matériaux (bâtiments par exemple) : il s'agit des pollutions de type urbain et/ou industriel (voir Tableau I-4). De plus, ils sont impliqués dans des processus physicochimiques qui vont modifier la composition de l'atmosphère.
- A l'échelle des jours, et par conséquent sur des espaces plus éloignés des sources de pollution (quelques centaines de kilomètres par exemple), les pollutions vont affecter les écosystèmes et selon les concentrations, des effets sur la santé humaine pourront être observés. En effet, les polluants atmosphériques vont être présents dans les divers compartiments environnementaux résultant d'échanges de l'atmosphère avec la biosphère, l'hydrosphère, la lithosphère et la pédosphère. Les dépôts secs et/ou humides sur les végétaux vont induire des perturbations dans le cycle de la photosynthèse ou de la respiration. Lorsque les végétaux interviennent dans ce cycle, ils deviennent des réservoirs à polluants lors de phénomènes de bioaccumulation, impliquant par exemple les métaux ou les composés organiques. Les polluants présents dans les feuilles, la végétation et/ou les fruits vont alors être accessibles aux êtres vivants. La végétation, le lait ou la viande seront, par exemple, les vecteurs du transfert des polluants vers l'Homme [23].
- A l'échelle de la planète, les conséquences de la pollution atmosphérique sont la dérive de l'effet de serre et l'amincissement de la couche d'ozone ; ces phénomènes sont observés à l'échelle de plusieurs années et chacun des polluants cités précédemment prend part à l'un ou l'autre de ces phénomènes. Ces dernières années plusieurs de décès étaient directement imputés, à la pollution atmosphérique, et notamment aux particules fines émises par les sites industriels.

Les conséquences de la pollution atmosphérique ont entraîné une prise de conscience générale, tant des populations que des pouvoirs publics et politiques. Des cadres réglementaires ont été construits dans les pays concernés puis à l'échelle du monde et enfin

à l'échelle internationale, afin de limiter les émissions et les conséquences sur l'Environnement et la santé publique [22].

4.2. Pollution atmosphérique et mortalité

L'évaluation de l'impact de la pollution atmosphérique dans les épidémies de décès observés en période de vague de chaleur utilise généralement comme traceurs de cette pollution les particules inférieures à $10\ \mu\text{m}$ (PM10) et l'ozone, pour lequel une relation causale entre l'exposition et des effets néfastes pour la santé a été observée lors de nombreuses études épidémiologiques.

Plusieurs travaux ont montré l'existence d'une corrélation entre l'augmentation du taux de mortalité et celle du niveau d'ozone extérieur. Des taux de mortalité supérieurs de 0,39%, 0,41% et 0,66% ont été enregistrés pour une augmentation de $20\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ de la concentration horaire d'ozone 2 tandis qu'une augmentation de $50\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ a conduit à une mortalité 4% plus importante. Pour une concentration journalière supérieure de $20\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, l'augmentation de risques a atteint 0,87% [23].

4.3. Impacts sanitaires et environnementaux

4.3.1. Impacts sur la santé :

Les effets des aérosols vont dépendre principalement de deux facteurs : leur granulométrie et la nature des composés adsorbés à leur surface. Tout d'abord, la taille de la particule va engendrer un parcours plus ou moins profond dans les voies respiratoires.

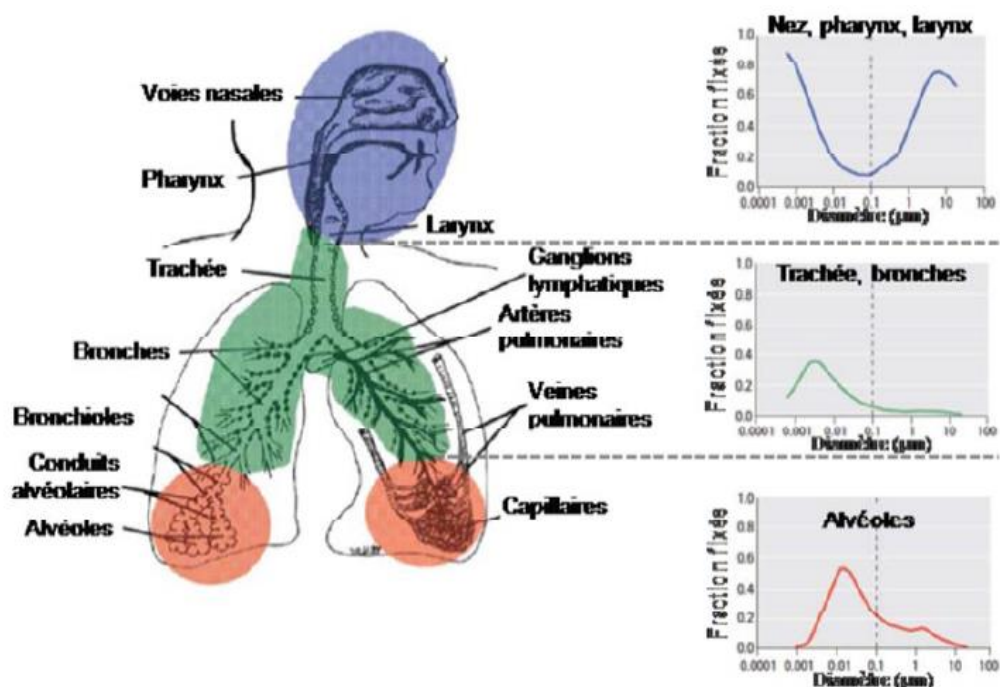


Figure I-4 : Fractions particulières atteignant diverses parties du système pulmonaires [22].

Comme l'illustre la Figure I-4, les particules grossières, aussi appelées « fraction inhalable », vont être précipitées sur les tissus du pharynx et dégluties. Elles peuvent toutefois entraîner d'éventuelles irritations de la partie supérieure du système respiratoire (impaction sur les tissus). Les particules fines (fraction thoracique) atteignent quant à elles les bronches et la trachée et vont causer des gênes respiratoires notamment chez les personnes les plus sensibles, voire sur toute personne exposée à de fortes concentrations particulières. Enfin, les particules ultrafines vont entrer très profondément dans les poumons pour atteindre les alvéoles et aller jusqu'à franchir les barrières cellulaires pour intégrer le système sanguin. En revanche, ce dernier point reste incertain puisque Mills et al. (2006) ont montré que les particules ultrafines ne franchissaient pas systématiquement les frontières poumons-système sanguin contrairement à ce qui était jusqu'alors supposé. D'autres effets observés sur des sujets exposés aux particules sont les problèmes cardiovasculaires. Il a été mis en évidence une augmentation du rythme cardiaque chez des personnes en bonne santé ou souffrant de maladies respiratoires lors de leur exposition à des particules. De plus, du fait de la composition chimique des aérosols pénétrant dans les profondeurs du système respiratoire, des molécules cancérigènes, reprotoxiques ou mutagènes peuvent franchir les tissus cellulaires : c'est le cas, par exemple, de composés soufré ou des hydrocarbures aromatiques polycycliques [22].

4.3.2. Impacts sur l'Environnement

Les impacts sur l'Environnement concernent diverses échelles, à savoir l'échelle des écosystèmes et l'échelle globale de la planète. Concernant les écosystèmes, le principal effet provient du dépôt des particules à la surface des végétaux qui va limiter leur photosynthèse et les exposer aux polluants adsorbés à la surface des particules. De plus, il est avéré que les végétaux représentent une voie de transfert des polluants atmosphériques vers les sols et l'accumulation des polluants est parfois avérée [24]. Par exemple, les particules déposées sur les mousses ou les lichens sont désagrégées dans le thalle et les éléments adsorbés à leur surface vont s'y accumuler : on parle alors de bioaccumulation. Ces végétaux sont particulièrement étudiés pour effectuer la bio surveillance des milieux et déterminer les liens entre les concentrations en polluants dans les milieux et celles dans les végétaux [25].

4.4. Effets des NO_x et CO sur la santé et l'environnement

4.4.1 Effets du NO_x

- *Sur la santé :*

Le NO, qui est un gaz incolore et ininflammable, n'est pas toxique pour l'homme. Par contre, caractérisé par une couleur brun-rouge et une odeur acide et piquante, le NO₂ peut pénétrer profondément dans les voies respiratoires et peut ainsi avoir des effets néfastes sur la santé humaine.

Pour des personnes en bonne santé, une exposition de quelques heures et à des concentrations se situant au-dessus de 1 ppm peut provoquer une irritation des yeux et des voies respiratoires. Pour les personnes sensibles (surtout les asthmatiques, les malades pulmonaires chroniques et les enfants), une exposition d'une même durée et à des concentrations supérieures à 0.3 ppm peut entraîner une altération de la fonction respiratoire et une hyperréactivité bronchique.

Des effets à long terme sont aussi observables, notamment chez les enfants, qui présentent une augmentation de la sensibilité du poumon aux infections bactériennes lors d'une exposition d'un an et plus.

- *Sur l'environnement :* Contribuant à l'acidification de l'environnement et à la formation de l'ozone troposphérique et de particules fines, les oxydes d'azote peuvent avoir des effets néfastes sur la végétation, les écosystèmes et les bâtiments. Les émissions acides sont transformées de manière chimique en sels azotés, sont déposées à sec et sous forme de poussières ou d'autres particules et provoquent ainsi un déséquilibre dans la composition de l'air, du sol et des eaux de surface. Les conséquences de ces dépôts acides sont le dépérissement forestier, l'acidité des lacs, le déséquilibre nutritif dans les sols et la dégradation du patrimoine architectural.

Comme précurseur de l'ozone et de particules fines, les oxydes d'azote interviennent aussi indirectement dans la problématique environnementale que ces polluants apportent [26].

4.4.2 Effets du CO

- *Sur la santé :* Le CO que nous respirons se fixe de façon irréversible sur l'hémoglobine et bloque ainsi l'oxygénation du système nerveux et du cœur. De faibles expositions à ce gaz toxique peuvent déjà provoquer des maux de tête et des nausées tandis que des concentrations élevées en CO pendant une courte durée peuvent être à l'origine de vomissements, d'évanouissements et de convulsions.

Lors d'une exposition prolongée à des taux plus faibles, on peut observer une diminution des capacités physiques et intellectuelles et une baisse de la perception visuelle, même

chez des personnes en bonne santé. Une exposition importante prolongée peut avoir des conséquences neurologiques irréversibles et peut même entraîner des empoisonnements qui sont la cause de fréquents accidents mortels en milieu domestique, provoqués surtout par un mauvais réglage des chauffe-eaux au gaz.

- *Sur l'environnement* : Comme Le CO affecte les écosystèmes en participant à l'acidification de l'air, des sols et des cours d'eau. En plus, ce gaz influence indirectement l'effet de serre comme il contribue à l'augmentation des principaux gaz à effet de serre tels que le CO₂ (dioxyde de carbone), le CH₄ (méthane) et le N₂O (oxyde nitreux). Ainsi, une quantité élevée en CO dans l'atmosphère contribue indirectement à un réchauffement de la planète. En plus, le CO participe à la formation de l'ozone troposphérique, qui lui peut avoir une influence directe et néfaste sur les écosystèmes [26].

5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté la pollution atmosphérique ainsi que les différents polluants atmosphériques et leurs impacts sur la santé et l'environnement. Cette introduction à la problématique de la pollution de l'air sera suivie par celle de la modélisation numérique des nuages de pollution, partie que nous aborderons dans le chapitre suivant.

Références du chapitre I

Références du chapitre I

- [1] <http://www.predit.prd.fr> (programme Primequal-Predit de recherche inter-organisme pour une meilleure qualité de l'air).
- [2] P. Melquiot. Mémento de la réglementation environnementale française et européenne. 2004.
- [3] I. Bourboulon. Des villes asphyxiées par l'automobile. Le monde diplomatique. 1997.
- [4] F. Vendel. Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de site industriel. Thèse de doctorat de l'Université de Lyon, France. 2011.
- [5] H. Mayer. Air pollution in cities. Atmospheric Environment. Vol. 33. Pp 4029-4037, 1999.
- [6] C. Puente-lievre. La qualité de l'air en milieu aéroportuaire : étude sur l'aéroport Paris-Charles-De-Gaulle. Thèse de doctorat de l'école doctorale Sciences et Ingénierie, France. 2009.
- [7] L. Pascal. Effet à court terme de la pollution atmosphérique sur la mortalité. Revue française d'allergologie. Vol. 49. 2009.
- [8] <http://www.omer7.sedoo.fr>. Outils numériques pour l'étude des Sciences de l'Environnement Terrestre.
- [9] Z. Al barkeh. Suivi de pollution atmosphérique par système multi-capteur_ méthode mixte de classification et de détermination d'un indice de pollution. Thèse de doctorat de l'École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne, France. 2012.
- [10] U. Anthony. Cartographie de la pollution atmosphérique en milieu urbain à l'aide de données multi sources. Thèse de doctorat de l'Université Paris 7 – Denis Diderot, France. 2003.
- [11] R. Gwenaël. Qualité de l'air sur et autour de la plate-forme aéroportuaire de paris-charles de gaulle (aéroports de paris). Rapport technique. 2009.
- [12] M. Squilbin, S. Davesne. Directives de la qualité de l'air de l'organisation mondiale de la santé. Bruxelles-Environnement. IBGE.2015.
- [13] <https://arabic.euronews.com/weather/copernicus-air-quality-index> (eea.europa.eu/fr) en 2017
- [14] Décret exécutif n° 06-03. Journal officiel de la république algérienne N° 01. 7 janvier 2006.
- [15] L. Gorintin. Etude et réalisation de transistors à nanotubes de carbone pour la détection sélective de gaz. Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique, France. 2011.

Références du chapitre I

- [16] W. Göpel. Nanostructured sensors for molecular recognition. *Philosophical transactions: Physical sciences and engineering*. 353:333-354, 1995.
- [17] A. Hulanicki SG, F. Ingman. Chemical Sensors Definitions and classification. *Pure & Appl Chem*, 63:1247-1250, 1991.
- [18] W. Ihokura. *The Stannic Oxide Gas Sensor: Principles and Applications*. CRC Press. 1994.
- [19] F. Menil. Modélisation des temps de réponse des capteurs chimiques. *Chemistry*, 4:899-905, 2001.
- [20] C. Pijolat. Micro-capteur de gaz élaboré à partir de matériaux solides. [Section] // LES CAPTEURS CHIMIQUES. - [s.l.]: CMC2. 1997.
- [21] CA. Pope, DW. Dockery. Health effects of fine particulate air pollution: lines that connect. *J Air Waste Manag Assoc*, 56(6):709-42. 2006.
- [22] P. Brimblecombe, RL. Maynard. *The urban atmosphere and its effects*. Imperial college press. 2001.
- [23] D.M. Pinto, J.D. Blande, S.R. Souza, A.M. Nerg et J.K. Holopainen. Plant volatile organic compounds (VOCs) in ozone (O₃) polluted atmospheres: the ecological effects. *Journal of Chemical Ecology*, 36: 22–34. 2010.
- [24] L. Foan, C. Sablayrolles, D. Elustondo, E. Lasheras, L. González, A. Ederra, V. Simon et J.M. Santamaría. Reconstructing historical trends of polycyclic aromatic hydro carbon deposition in a remote area of Spain using herbarium moss material. *Atmospheric Environment*, 44: 3207-3214. 2010.
- [25] H.M. Anawar, N. Canha et M. Do Carmo Freitas. Evaluation of atmospheric particle dispersion at contaminated mine using biomonitors. *International Journal of Environment and Health*, 5: 84-92. 2011.
- [26] N. Yves. surveillance de la qualité de l'air dans le métro de Marseille. effet sanitaire, 2010.

Chapitre II

Modélisation numérique des nuages de pollution

1. Introduction :

La pollution de l'air peut résulter d'émissions diffuses (circulation automobile, installations industrielles...) ou d'émissions ponctuelles et canalisées. Cependant, le devenir des polluants après leur émission dans l'atmosphère peut être analysé grâce à la modélisation des nuages émis. Les effluents gazeux sont souvent émis à des températures supérieures à la centaine de degrés et à des vitesses pouvant atteindre la dizaine de mètres par seconde [1].

L'objectif de ce chapitre est le suivi spatial des concentrations des polluants à partir des données physiques et météorologiques relatifs à la torche de la cheminée au niveau du complexe industriel GL1K (voir annexe). Nous présentons les bases de la modélisation numérique des processus physiques de la concentration d'une espèce chimique.

La surveillance d'évolution de la concentration des polluants spatialement est donnée par une équation de type advection-diffusion –réaction «l'équation de dispersion réactive», cette équation est généralement appelée modèle de chimie-transport (CTM Chemistry Transport Models en anglais). La résolution numérique de l'équation de dispersion réactive permettra la modélisation de pollution et le suivi des concentrations des polluants gazeux [2].

2. Problématique de la modélisation

La modélisation peut être définie comme l'opération par laquelle on établit le modèle d'un système complexe, afin d'étudier plus commodément et de mesurer les effets sur ce système des variations de tel ou tel de ses éléments composants".

Dans notre contexte, un modèle est un ensemble d'équations mathématiques qui permettent de décrire les relations entre différentes "variables" et leur évolution. La température ou la concentration dans l'air d'un polluant sont des exemples typiques de variables en modélisation de la pollution atmosphérique. L'intérêt d'un modèle est dans un premier temps de s'assurer que notre compréhension des processus représentés est correcte. Cela peut se faire en comparant les variables observables du modèle à des mesures. Le deuxième avantage réside dans sa supposée capacité à fournir des informations sur les variables d'intérêt sans pour autant que l'on ait de mesures à effectuer. Ce qui peut permettre notamment d'obtenir des informations sur des grandeurs que l'on ne sait pas mesurer, dans des lieux où l'on ne peut pas mesurer et dans des temps futurs ou passés (prévision, reconstitution, études d'impact, prospective).

La modélisation physique des phénomènes de pollution atmosphérique est rendue complexe par la diversité des mécanismes qu'elle peut faire intervenir (mécanique des fluides, chimie, rayonnement, physique des aérosols, etc...). Ceux-ci étant susceptibles d'interagir les uns sur les autres. Le réalisme de la description par le modèle est à adapter à la problématique à laquelle on s'intéresse, l'emploi de paramétrisations permettant éventuellement de pallier le manque de finesse du modèle. Dans notre travail, nous aurons recours à un modèle de chimie-transport déterministe, eulérien tridimensionnel [3].

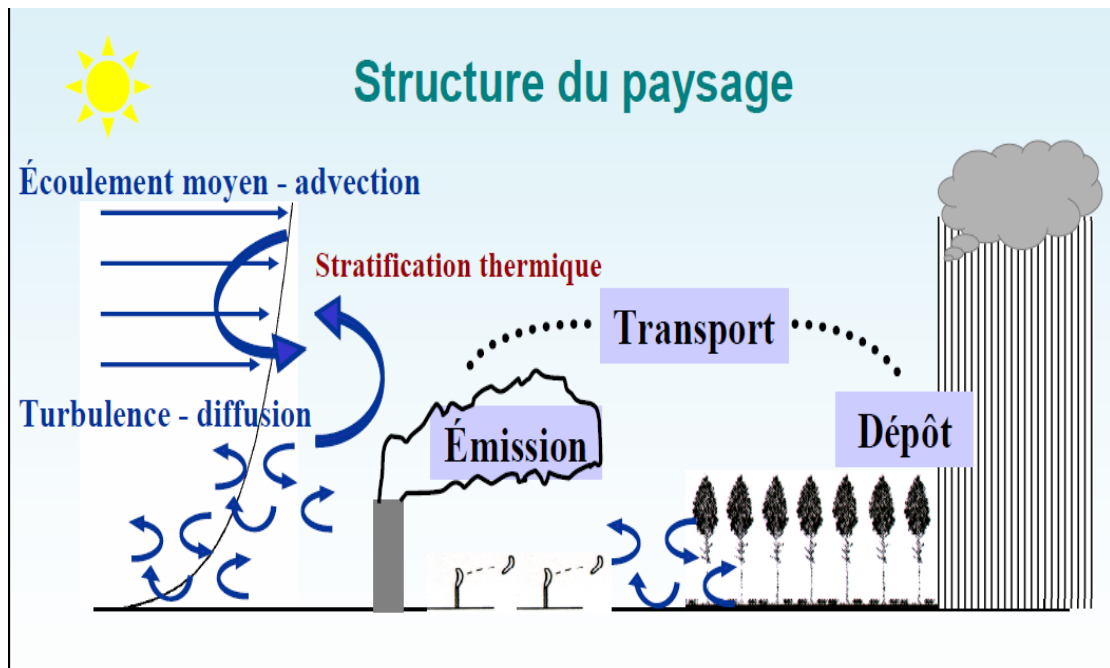


Figure II-1 : la pollution atmosphérique [4].

3. La dispersion dans la couche limite atmosphérique :

3.1. Éléments de micro-météorologie :

3.1.1. Structure de l'atmosphère :

Le phénomène de dispersion atmosphérique des effluents industriels intervient au sein de la troposphère, couche la plus basse de l'atmosphère terrestre, dans une zone appelée couche limite atmosphérique. Cette dernière est définie comme la partie de l'atmosphère directement influencée par la présence de la surface terrestre et répondant aux forçages induits à des échelles de temps de l'ordre de l'heure. Zone en constante évolution, elle représente en moyenne 10 % de la partie inférieure de la troposphère, son altitude variant de quelques centaines de mètres à quelques kilomètres.

La couche de surface atmosphérique représente les 10% de la partie basse de la couche limite atmosphérique. Nommée communément couche inertielle ou couche à flux constants, on lui applique généralement la théorie de similitude de Monin-Obukhov. De

par sa proximité à la surface terrestre, elle est le siège de deux sources de turbulence, d'origine dynamique et thermique.

La turbulence d'origine dynamique est liée au frottement au sol de l'écoulement. Constamment générée au sein de la couche de surface atmosphérique, son intensité est liée à la rugosité dynamique de la surface considérée : pour un vent donné, plus cette propriété intrinsèque du sol est grande, plus la turbulence d'origine dynamique est forte. La turbulence d'origine thermique est quant à elle liée aux échanges thermiques entre la surface terrestre et l'atmosphère, variables selon le cycle diurne du rayonnement solaire. L'état de stratification thermique de l'atmosphère est alors lié à son intensité.

3.1.2. Stabilité de l'atmosphère :

Si les échanges horizontaux sont liés essentiellement au transport par le vent, le vent vertical est très faible et le transport vertical des polluants est principalement turbulent. Il est lié notamment à la turbulence d'origine thermique, due au réchauffement au sol par le rayonnement solaire. De plus, la convection nuageuse, lorsqu'elle se produit, est une source importante de transport vertical.

La turbulence atmosphérique est souvent associée à la notion de stabilité, qui dépend du profil vertical de température. Dans une atmosphère instable, une parcelle d'air chaud, en montant, se refroidit moins vite que le gradient vertical de température. Ainsi, la différence entre la parcelle d'air chaud et l'air ambiant s'amplifie, accentuant le mouvement ascendant. Cela provoque de grands mouvements d'air convectifs, donc une dispersion importante des polluants. Notons d'ailleurs que dans ce cas, l'hypothèse d'une distribution gaussienne du panache sur la verticale n'est plus valable, car elle ne distingue pas les mouvements convectifs ascendants et descendants qui peuvent se produire. Certains modèles représentent alors la distribution verticale du panache par la somme de deux gaussiennes, l'une dans le mouvement ascendant, l'autre descendant. Inversement, dans une atmosphère stable, les mouvements convectifs d'origine thermique sont très faibles ou inexistantes. Si une parcelle montante se refroidit plus vite que le gradient vertical de température, la différence de température avec l'air ambiant diminue et le mouvement ascendant est freiné. La limite entre les deux situations est appelée atmosphère neutre [5].

La notion de température potentielle est généralement préférée à celle de température absolue T pour caractériser l'état de stratification de l'atmosphère. Définie comme la température d'une parcelle d'air amenée adiabatiquement de sa position initiale à une pression de référence P_{ref} au niveau de la mer, elle permet d'étudier les gradients

thermiques en s'affranchissant des effets causés par les variations de pression avec l'altitude [6].

Pour s'affranchir de ces variations verticales de pression, il est alors intéressant d'introduire la notion de température potentielle θ , définie par :

$$\theta = T \left(\frac{P_{ref}}{P} \right)^\gamma \quad (\text{II.1})$$

θ : La température potentielle en [K].

T : La température en [K].

P : La pression en [hPa].

P_{ref} : La pression de référence, fixée à 1000 hPa.

$\gamma = R^*/C_p$.

R^* : constante des gaz parfaits pour l'air sec.

C_p capacité calorifique massique à pression constante [7].

La chaleur massique à P constante C_p [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$] = [$\text{m}^2.\text{s}^{-2}.\text{K}^{-1}$].

La stabilité de l'atmosphère est caractérisée par trois états (stable, neutre, instable) décrivant le comportement d'une parcelle d'air écartée, selon la verticale et de façon adiabatique, de son état d'équilibre.

Cette température potentielle est alors la température de l'air (initialement à la température T et à la pression P) une fois ramenée de façon adiabatique au niveau de pression de référence P_{ref} .

- Elle permet de définir trois états atmosphériques différents:

Gradient de θ = écart à une situation adiabatique.

-Lorsque l'atmosphère est parfaitement adiabatique, θ est constant et on parle d'*atmosphère neutre*.

-Lorsque θ diminue avec l'altitude, l'atmosphère est *instable*, et dans cette situation le mouvement vertical d'une particule d'air est amplifié par l'effet de la flottabilité ; dans le cas contraire l'atmosphère est *stable*.

L'état de l'atmosphère est souvent décrit à travers les classes de stabilité dites de classes de Pasquill et Classes de Turner [6].

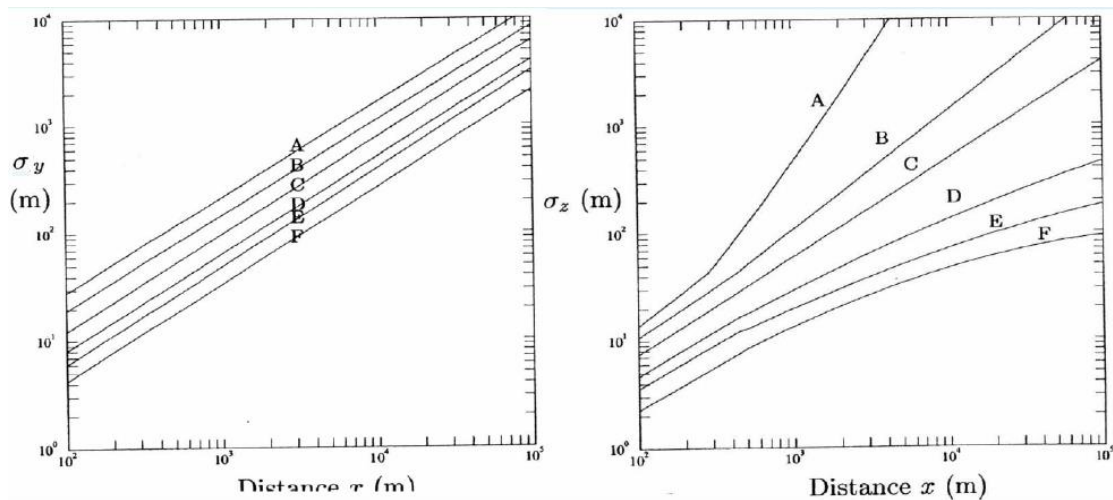
3.1.2.1. Classes de Pasquill :

Il s'agit d'une méthode indirecte à partir des valeurs de vitesse du vent, du rayonnement solaire et de la nébulosité. Six classes de A à F caractérisent les états des plus instables aux plus stables (Tableau II-1).

Tableau II-1: Classes de stabilité de Pasquill [8].

	Classes de stabilité en journée			Classes de stabilité de nuit	
	Radiation solaire incidente			nébulosité	
Vent à 10m (m/s)	forte	modérée	Faible	Entre 4/8 et 7/8	< 3/8
$U < 2$	A	A-B	B	-	-
$2 \leq U \leq 3$	A-B	B	C	E	F
$3 \leq U \leq 5$	B	B-C	C	D	E
$5 \leq U \leq 6$	C	C-D	D	D	D
$6 \geq U$	C	D	D	D	D

A : très instable B : instable C : peu instable D : neutre E : stable F : très stable



A : très instable B : instable C : peu instable D : neutre E : stable F : très stable

Figure II-2 : Abaques des coefficients de dispersion de Briggs en milieu urbain [7].

3.1.2.2. Classes de Turner :

méthode indirecte à partir des valeurs de vitesse du vent, de l'index de radiation net NRI, variable avec l'altitude, l'azimuth et le taux d'ensoleillement (tableau II-2)

Tableau II-2: Classes de stabilité de Turner [4].

Vitesse du vent au sol (m/s)	NRI						
	4	3	2	1	0	-1	-2
0-1	1	1	2	3	4	6	7
2-3	1	2	2	3	4	6	7
4-5	1	2	3	4	4	5	5
6	2	2	3	4	4	5	6
7	2	2	3	4	4	4	5
8-9	2	3	3	4	4	4	5
10	3	3	4	4	4	4	5
11	3	3	4	4	4	4	4
>= 12	3	4	4	4	4	4	4

1 : très instable 2 : instable 3 : peu instable 4 : neutre 5 : peu stable 6 : stable 7 : très stable

La prise en compte de l'état de stabilité de l'atmosphère apparaît donc comme importante dans les études atmosphériques, pour déterminer les profils verticaux de température et de vitesse de l'écoulement mais aussi les paramètres de turbulence, affectant ainsi la dispersion des polluants atmosphériques.

3.2. La dispersion atmosphérique :

3.2.1. Définition :

La dispersion turbulente de polluants atmosphériques est un phénomène physique d'évolution dans le temps et dans l'espace, d'un nuage d'effluents issu d'un rejet continu ou instantané, volumique ou ponctuel. Elle résulte de l'interaction des processus d'advection, de diffusion moléculaire et de diffusion turbulente.

L'advection permet le transport de l'espèce chimique par le champ de vitesse relatif au vent dominant. La diffusion moléculaire transporte la matière à une échelle microscopique et conduit, à plus grande échelle, à une dilution de l'espèce chimique dans l'espace. La diffusion turbulente est quant à elle responsable du transport et de la déformation progressive du nuage de polluants par l'ensemble des structures turbulentes [6].

3.2.2. Influence de la stabilité atmosphérique sur la dispersion d'un panache :

Le degré de stabilité atmosphérique peut également être caractérisé en comparant le gradient vertical de température au gradient adiabatique [4]. Pour ce faire on calcule le Nombre de Richardson de gradient (Ri) donné par l'équation suivante :

$$Ri = \frac{g}{\bar{T}} \frac{(\frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \Gamma)}{(\frac{\partial U}{\partial z})^2} \quad (\text{II.2})$$

$$\Gamma_{ad} = \frac{1^\circ C}{100m}$$

g : La gravité en $[m.s^{-2}]$.

T : La température en $[K]$.

z : l'altitude en $[m]$.

U : La vitesse de frottement en $[m.s^{-1}]$.

Et pour estimer Ri :

$$Ri: Ri(z_m) \approx \frac{gz_m}{\bar{T}_m} \ln(z_2/z_1) \frac{(\bar{T}_2 - \bar{T}_1)}{(\bar{U}_2 - \bar{U}_1)^2} \quad (\text{II.3})$$

$Ri < 0$ atmosphère instable

$Ri = 0$ atmosphère neutre

$Ri > 0$ atmosphère stable

- Conditions de forte stabilité (vent modéré) $\frac{\partial T}{\partial z} > -1^\circ \frac{C}{100m} = -\Gamma_{ad}$; $Ri > 0$

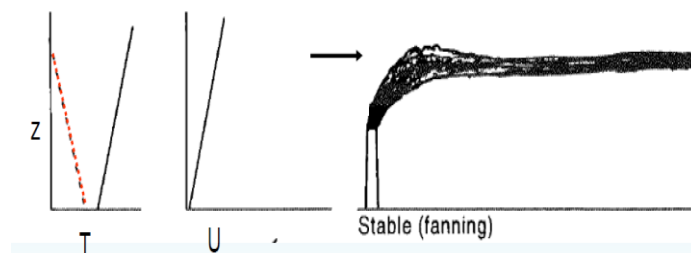


Figure II-3 : nuage très stable [8].

- Conditions de stabilité neutre (vent fort) $Ri \approx 0$; $\frac{\partial T}{\partial z} \approx -\Gamma_{ad}$

a. L'atmosphère est neutre : lorsque le gradient vertical de température potentielle est nul. La température potentielle est alors uniforme sur toute la verticale et les échanges thermiques entre l'atmosphère et la surface terrestre sont inexistants. La particule reste à l'état où elle a été amenée adiabatiquement [4].

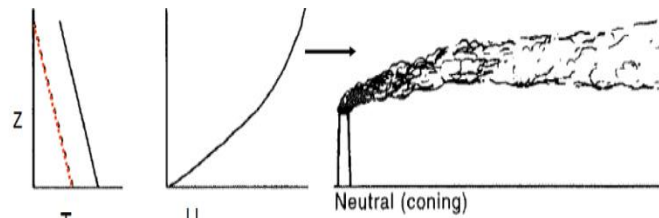


Figure II-4 : nuage de stabilité neutre [8].

- Conditions de forte instabilité (vent faible) $Ri < 0$; $\frac{\partial T}{\partial z} < -1^\circ\text{C}/100\text{m} = -\Gamma_{ad}$

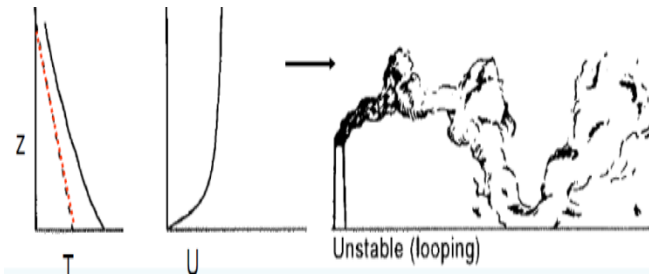


Figure II-5 : nuage instable [8].

b. L'atmosphère est stable : lorsque le gradient vertical de température potentielle est positif. Les masses d'air froides, plus lourdes, sont situées sous les masses d'air chaudes et les échanges thermiques se font de l'atmosphère vers la surface terrestre. La parcelle d'air a alors tendance à revenir vers son état initial. Cet état de l'atmosphère survient généralement la nuit, lorsque le sol se refroidit.

Conditions d'inversion au-dessous du sommet de la cheminée et instabilité (ou neutralité) au-dessus

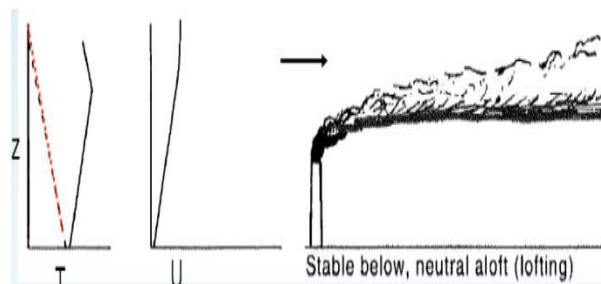


Figure II-6 : nuage stable à partir du sol [8].

c. L'atmosphère est instable : lorsque le gradient vertical de température potentielle est négatif. Les masses d'air chaudes, plus légères, sont situées sous les masses d'air froides et les échanges thermiques se font de la surface terrestre vers l'atmosphère. La parcelle d'air a alors tendance à s'éloigner de son état initial. Cet état convectif se rencontre principalement durant la journée, lorsque les rayons lumineux réchauffent le sol [6].

Conditions d'inversion au-dessus du sommet de la cheminée et d'instabilité (ou neutralité) au-dessous

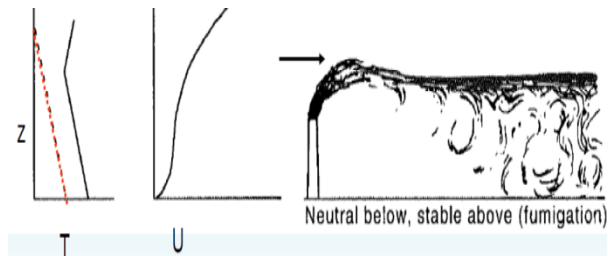


Figure II-7 : nuage instable à partir du sol [8].

3.2.3. Influence de la stratification thermique :

La dispersion turbulente est fortement dépendante de l'état de stratification de l'atmosphère et des processus turbulents dominants qui en découlent. L'évolution d'un panache de fumée suivant les conditions de stratification de l'atmosphère peut être schématisée comme suit (Figure II-8).

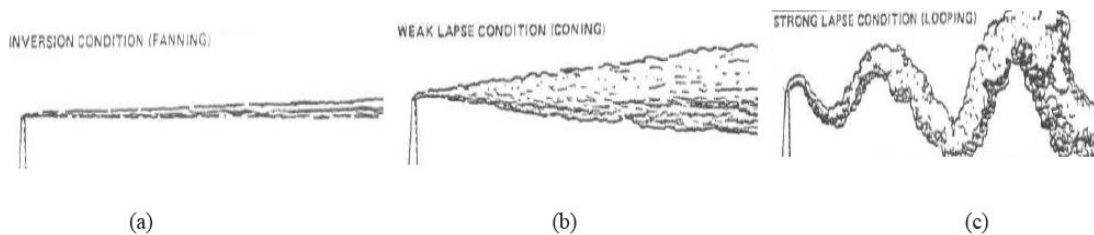


Figure II-8 : Dispersion d'un panache de fumée en condition (a) stable, (b) neutre, (c) instable [8].

Au sein d'une atmosphère stable, où les échanges verticaux sont limités et la dispersion réduite, le panache, de forme tubulaire, est confiné dans une zone verticale restreinte. D'importantes concentrations en polluants sont en général observées dans ces conditions, au centre du panache.

Le panache en condition de stratification neutre est quant à lui plus étalé. La distribution spatiale des concentrations dans un plan transversal, en fonction de la distance à l'axe du panache, est proche de la distribution gaussienne.

Au sein d'une atmosphère instable, les fortes turbulences atmosphériques amplifient les échanges entre les couches d'air et diluent les concentrations en polluants [6].

3.3. Principales phases de la dispersion :

La diffusion des polluants issus d'une telle cheminée peut schématiquement être décomposée en quatre phases successives en fonction du temps et de la distance par rapport à la source [9].

a) Première phase : la surélévation du panache

Cette première phase se traduit par une surélévation du panache au-dessus de la cheminée. Cette surélévation, qualifiée de «sur-hauteur », est en pratique égale à la hauteur au-dessus de la cheminée à laquelle le panache est devenu horizontal, la hauteur effective étant alors la somme de la hauteur de la cheminée et de la surélévation du panache.

b) Seconde phase : l'évolution du panache

La seconde phase d'évolution du panache débute lorsque sa densité est devenue sensiblement égale à celle de l'air ambiant. Le panache qui est devenu horizontal n'a plus de mouvement propre, sa diffusion dépend principalement des conditions météorologiques locales et de la turbulence atmosphérique. La turbulence et le vent vont accroître les dimensions du panache initial, le diluer et l'entraîner sur une zone plus ou moins étendue.

Au cours de cette phase, le panache peut atteindre le sol ; ce phénomène commence à se manifester à des distances de l'ordre de dix à vingt fois la hauteur effective d'émission. Au-delà, les concentrations de polluants mesurées au sol pourront atteindre leur valeur maximale.

c) Troisième phase : la diffusion à l'échelle régionale

La troisième phase d'évolution d'un panache se situe dans le domaine de la diffusion à l'échelle régionale, qui correspond à des distances de l'ordre de 20 à 400 kilomètre en aval de la source.

Au début, le panache peut encore se différencier du point de vue physico-chimique de l'atmosphère environnante, puis progressivement, les polluants tendent à se répartir uniformément à l'intérieur d'une tranche d'atmosphère que l'on appelle la couche de mélange. Son épaisseur oscille de 1 à 2 kilomètres le jour, où la convection thermique est plus ou moins importante, à 200 ou 300 mètres la nuit.

d) Quatrième phase : le transport des polluants sur de longues distances

La quatrième phase d'évolution correspond au transport des polluants sur de longues distances, à plusieurs centaines, voire plusieurs milliers de kilomètres des points d'émission. Les mouvements de l'atmosphère à l'échelle synoptique conditionnent la trajectoire des polluants.

3.4 Facteurs météorologiques influant la dispersion des polluants atmosphériques :

Les facteurs météorologiques influant la dispersion des polluants atmosphériques sont les éléments de l'atmosphère qui contribuent à la formation des climats. Ce sont :

- La température,
- La hauteur de la couche de mélange,
- Le vent,
- La topographie (indirectement).

a) La température :

La turbulence atmosphérique joue un rôle important dans la dispersion des polluants, notamment à l'échelle locale et régionale. Cette turbulence qui se manifeste par des variations de la vitesse et de la direction du vent autour d'une valeur moyenne, a principalement deux origines : l'une dynamique (due aux obstacles et au non homogénéité du sol), l'autre thermique (due à la structure thermique de l'atmosphère) [10].

Pour comprendre le rôle de la structure thermique de l'atmosphère dans la dispersion des polluants, on peut imaginer une parcelle d'air déplacée verticalement au sein d'un air au repos. La pression atmosphérique diminuant avec l'altitude, cette parcelle d'air se dilate et se refroidissement est constant, il s'agit du gradient adiabatique, dont la valeur est voisine de 10 degrés par kilomètre gagné en altitude pour un air sec.

Toutefois cette parcelle d'air va traverser les couches d'air dont la température décroît elle aussi avec l'altitude ; la basse atmosphère étant chauffée principalement par le rayonnement terrestre, l'air est en effet plus chaud près du sol [11].

Cette décroissance est en moyenne égale à 7 degrés par kilomètre sous nos latitudes, mais elle n'est pas constante, contrairement au gradient adiabatique, et varie en fonction des conditions météorologiques. Il en résulte que l'ascension de la parcelle d'air va dépendre de la valeur de la poussée d'Archimède créée par sa différence de densité avec l'air ambiant, cette différence liée à l'écart entre le taux de refroidissement des couches de l'air ambiant en fonction de l'altitude.

Lorsque le taux de refroidissement de l'air avec l'altitude est plus élevé que le gradient adiabatique (c'est-à-dire supérieur à 10 degrés par kilomètre), la parcelle d'air qui s'élève demeure plus chaude et plus légère que les masses d'air environnantes. Elle poursuit son ascension. Dans ces mêmes conditions, une parcelle d'air soumise à un mouvement descendant se réchauffe moins vite que l'air ambiante : plus lourde, elle poursuit sa descente.

Dans certaines conditions on observe une inversion du gradient de température, situation au cours de laquelle, contrairement à la normale, de l'air chaud surmonte une couche d'air froid. L'atmosphère y est alors particulièrement stable [10].

Ces inversions peuvent se produire par rayonnement, le phénomène étant accentué lors des nuits sans vent et par ciel clair. Le refroidissement nocturne du sol entraîne la formation d'une couche d'air froid surmontée par de l'air demeuré plus chaud. La couche d'inversion s'épaissit progressivement et devient maximale à l'aube, pour se dissiper en matinée avec le lever du soleil et le réchauffement du sol. Ce phénomène est par ailleurs à l'origine des brumes et brouillards matinaux qui se forment en période humide par condensation de la vapeur d'eau atmosphérique.

Jusqu'à sa dissipation, la couche d'inversion va constituer un véritable couvercle qui bloque l'extension verticale des masses d'air qui rencontre en altitude des couches d'air plus chaudes et plus légères. Lors de telles situations, les panaches de cheminée peuvent prendre une allure typique, avec une faible dispersion verticale mais aussi une faible dispersion latérale, le vent étant généralement faible lors des inversions de rayonnement. Les phénomènes d'inversion de température peuvent durer plusieurs jours si le rayonnement solaire est insuffisant pour briser l'inversion. Cette situation est naturellement plus fréquente en hiver où conjuguée à des rejets importants d'oxydes de soufre et d'azote dus à l'utilisation plus intense des chauffages, elle peut conduire à des épisodes de pollution particulièrement aigus.

Les inversions de température peuvent aussi concerner de vastes zones, notamment en situation anticyclonique, régime de haute pression au cours duquel l'affaissement des masses d'air et leur réchauffement par compression adiabatique peuvent conduire à la formation d'une couche d'air chaud en altitude (inversion de subsidence).

Les inversions de température peuvent également résulter de conditions géographiques. Particulières, par exemple dans les régions encaissées où l'air froid des sommets s'écoule de nuit vers les vallées, ou lors des brises côtières.

b) La hauteur de la couche de mélange :

La diffusion verticale du polluant est confinée à l'intérieur d'une couche, dite couche de mélange, limitée en bas par le sol, et en haut par la base de l'inversion de température d'altitude (altitude à partir de laquelle s'observe une augmentation du gradient vertical de température). Cette altitude s'observe couramment aux environs de quelques centaines de mètres [10].

La hauteur jusqu'à laquelle la pollution est mélangée, est de loin le plus important des paramètres déterminants pour les niveaux de concentration au sol. Les concentrations diminuent quand la hauteur de la couche de mélange augmente. Avec une couche de mélange de 800 m de haut, la pollution se disperse dans un volume quatre fois plus grand qu'avec une couche de mélange de 200 m de haut. Dans le dernier cas, les concentrations au sol sont quatre fois plus élevées.

c) Le vent :

Le vent résulte du déplacement des masses d'air (mouvement conditionné par les variations de pression et de températures atmosphériques). Il dilue continuellement, dans la direction du transport du panache, les polluants libérés point d'émission. L'absence de vent (situation calme), contribue à l'accumulation des polluants près des sources.

La vitesse du vent intervient dans le temps de transport des polluants entre la source et les récepteurs, et limite l'ascension des panaches flottants dans l'atmosphère. Elle varie en fonction de l'altitude du fait du freinage de l'air par sol.

La direction du transport du panache est très importante pour l'estimation de l'impact d'une source sur des récepteurs sensibles. Lors des estimations à partir de modèles de diffusion, il est extrêmement important d'avoir une bonne connaissance de la direction du vent car un simple écart angulaire de 10° (la précision d'une mesure courante) peut faire la différence entre une concentration élevée et une valeur presque nulle [12, 13].

La direction du vent peut être modifiée au niveau du sol par les effets de la friction, et en altitude par la stratification thermique horizontal (transversal à la direction du vent) qui augmente la dispersion horizontale d'un panache de polluants. Cet effet est particulièrement important dans le cas de grandes centrales électriques, dont la hauteur des cheminées peuvent atteindre 300 m de hauteur ; dans ce cas, il est souhaitable de faire des mesures de la direction du vent en altitude à l'aide de tours, radiosondages, sodars, etc. pour estimer le transport sur la base de la direction observée à la hauteur effective du panache [14, 15].

d) La topographie : effet mécanique et thermique

L'influence d'une obstruction au vent se fait sentir, en amont, sur une distance relativement courte, de l'ordre de grandeur de la taille de l'obstruction, et se manifeste principalement par des variations locales de la distribution, de la vitesse et de la direction du vent. Il n'y a pas de modifications importantes de la structure turbulente. Par contre, à l'aval de l'obstruction, la turbulence, la vitesse et la direction du vent moyen sont affectées de façon appréciable.

Dans le cas de bâtiments isolés, il est assez rare que la production de chaleur soit suffisante pour créer une ascendance thermique importante. On admet toutefois que dans le centre des villes, la température peut être supérieure de 5°C à celle de la campagne environnante [16].

4. Le modèle CTM polaire 3D

4.1. Le modèle de chimie-transport

L'équation de transport est établie à partir des équations de Navier-Stokes réactives, et en utilisant les hypothèses de "dilution" et d'incompressibilité (la première consiste à négliger l'action des polluants sur l'écoulement du fluide). Fondamentalement, cette équation traduit le principe de conservation de la masse appliqué au polluant.

$$\frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \underbrace{-\operatorname{div}(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Advection par le vent}} + \underbrace{\operatorname{div}(\mathbf{K}_{\text{mol}}(\mathbf{x}, t)\nabla c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Diffusion moléculaire}} \quad (\text{II.4})$$

$$\underbrace{\lambda(\mathbf{x}, t)c(\mathbf{x}, t)}_{\text{Lessivage par les précipitations}} + \underbrace{\mathcal{X}(c(\mathbf{x}, t))}_{\text{Production /destruction chimique}} + \underbrace{\sigma(\mathbf{x}, t)}_{\text{Source}}$$

- $c(\mathbf{x}, t)$ est la concentration du polluant considéré, exprimée en unité de masse par unité de volume (par exemple en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), au lieu \mathbf{x} et à l'instant t . Les différents termes de cette équation représentent les phénomènes habituellement considérés pour modéliser l'évolution et le transport de cette concentration.
- L'advection par le vent $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ (en $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) traduit le fait que le polluant se déplace de concert avec la masse d'air au sein de laquelle il se trouve.
- L'homogénéisation des concentrations sous l'effet de la diffusion moléculaire est représentée à travers la matrice des coefficients de diffusivité $\mathbf{k}_{\text{mol}}(\mathbf{x}, t)$, (en $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$).
- Le terme de lessivage est un terme de perte prenant en compte le retrait de l'atmosphère d'une partie de la masse du polluant suite à son incorporation dans la phase précipitante. Les divers phénomènes paramétrés par le coefficient de lessivage $\lambda(\mathbf{x}, t)$ (en s^{-1}) sont particulièrement importants dans le cadre de l'étude d'impact des métaux lourds et permettent de quantifier le flux de dépôt humide.
- Le terme de chimie $\mathcal{X}(c(\mathbf{x}, t))$ (en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$) représente tous les processus de cinétique chimique, homogènes et hétérogènes, pris en compte dans le modèle. Il

peut jouer le rôle d'un terme de perte ou de source selon les nombreuses conditions qui le déterminent (température, concentrations des espèces, humidité, etc...).

- Enfin le terme de source correspond aux différentes émissions volumiques à l'intérieur du domaine modélisé (en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$) [17].

La complexité des écoulements atmosphériques liée à la turbulence rend inabordable leur description complète. On a donc recours à l'utilisation de variables moyennes et de paramétrisations pour représenter la turbulence de l'écoulement. Les champs de concentration $c(\mathbf{x}, t)$ et de vent $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ notamment peuvent être décomposés en la somme d'un champ "moyen" et de fluctuations autour de cette moyenne.

$$c(\mathbf{x}, t) = \overline{c}(\mathbf{x}, t) + c'(\mathbf{x}, t) \quad \text{et} \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) \quad (\text{II.5})$$

$\overline{\quad}$ dénotant l'opérateur de moyenne tel que,

$$\overline{c'(\mathbf{x}, t)} = 0 \quad \text{et} \quad \overline{\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t)} = 0 \quad (\text{II.6})$$

L'application de cet opérateur de moyenne à l'équation (4), en supposant la commutativité avec les opérateurs de dérivation, fait apparaître des produits de fluctuations.

Du terme d'advection provient le flux turbulent $\text{div}(\overline{c'\mathbf{u}'})$ qui peut-être paramétré à travers une matrice de coefficients turbulents, $\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)$ (en $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$), en se basant sur l'hypothèse classique de proportionnalité avec le gradient de la concentration moyenne (on est ici dans le cadre d'une fermeture de la turbulence à l'ordre 1) :

$$\text{div}(\overline{c'\mathbf{u}'}) = -\text{div}(\mathbf{K}(\mathbf{x}, t)\nabla c(\mathbf{x}, t)) \quad (\text{II.7})$$

L'effet d'homogénéisation des concentrations par la turbulence étant dans l'atmosphère beaucoup plus importante que celui de la diffusion moléculaire ($\mathbf{K} \gg \mathbf{K}_{mol}$), Cette dernière est par conséquent habituellement négligée.

Le terme de chimie qui n'est pas a priori linéaire peut également faire apparaître des produits de fluctuation de concentrations. Ceux-ci sont généralement négligés sous l'hypothèse de mélange rapide, ce qui revient considérer :

$$\overline{\chi(c(\mathbf{x}, t))} = \chi(\overline{c(\mathbf{x}, t)}) \quad (\text{II.8})$$

Des considérations précédentes on déduit l'équation moyenne effectivement employée pour représenter le transport des polluants dans l'atmosphère (l'opérateur de moyenne est omis pour la lisibilité).

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \underbrace{-\operatorname{div}(u(x,t)c(x,t))}_{\text{Advection par le vent}} + \underbrace{\operatorname{div}(K(x,t)\nabla c(x,t))}_{\text{Diffusion turbulente}} - \quad (\text{II.9})$$

$$\underbrace{\lambda(x,t)c(x,t)}_{\text{Lessivage par les précipitations}} + \underbrace{\mathcal{X}(c(x,t))}_{\text{Production/destruction chimique}} + \underbrace{\sigma(x,t)}_{\text{Source}}$$

L'équation (II.9) doit être associée des conditions aux limites et initiales. Une hypothèse habituelle pour les problèmes de pollution atmosphérique consiste à considérer que le transport dans la CLA est gouverné horizontalement par l'advection et verticalement par la diffusion. La limite de cette couche se caractérise justement par une diffusion turbulente verticale devenant négligeable. Le domaine modélisé allant au-delà de cette limite, l'advection redevient le phénomène prépondérant. Ces considérations mènent à utiliser les conditions aux limites suivantes sur les faces "latérales" et au sommet du domaine :

$$\psi(x,t) = n \cdot u(x,t)c(x,t) \text{ si } n \cdot u(x,t) > 0, \quad (\text{II.10})$$

Où $\psi(x,t)$ est le flux entrant (en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$) et n le vecteur normal à la surface considérée, orienté vers l'intérieur du domaine. Au sol la condition s'écrit de la façon suivante :

$$(K(x,t) \cdot \nabla c(x,t)) \cdot n = E(x,t) - v_d(x,t)c(x,t) \quad (\text{II.11})$$

Avec $E(x,t)$ un terme représentant les émissions surfaciques (en $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$) à l'intérieur du domaine et $v_d(x,t)$ un coefficient appelé "vitesse de dépôt sec" (en $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) qui permet de quantifier le flux de dépôt du même nom. C'est le deuxième processus de perte auquel on portera une attention particulière [3].

4.2. Traitement de la diffusion pour l'échelle locale :

On se place dans le cadre de l'hypothèse d'atmosphère neutre. On considère donc un terrain plat (sans obstacle ni effet de relief) et un mélange vertical homogène. Cela revient à considérer un flux de quantité de mouvement constant avec l'altitude et directement lié au cisaillement dans la couche limite τ . On définit la vitesse de frottement par :

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \quad (\text{II.12})$$

On a donc une relation de la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{u_*}{k_z} \quad (\text{II.13})$$

Ce qui nous mène au profil logarithmique du champ de vitesse :

$$u(z) = \frac{u_*}{k} \ln \frac{z+z_0}{z_0} \quad (\text{II.14})$$

On peut obtenir aussi le profil de la diffusion turbulente :

$$u_t = \rho u_* k(z + z_0) \quad (\text{II.15})$$

Le coefficient de diffusion turbulente est proportionnel à la diffusion turbulente et on admet souvent l'isotropie de la turbulence à l'échelle de la maille :

$$k_z = k_y = k_x = \frac{u_t}{\sigma_t} \quad (\text{II.16})$$

Où σ_t , le coefficient de proportionnalité est généralement pris égal à l'unité.

Dans ce qui précède, on suppose que le champ de vent ne subit pas de variations dues aux effets turbulents induits par le trafic. Les effets du trafic ne sont en tout cas pas négligeables sur la diffusion et ils sont même prépondérants selon Held et al.

Devant la diffusion turbulente atmosphérique libre. Les profils logarithmiques théoriques ne sont pas toujours retrouvés lors de campagnes de mesures.

On essaye alors d'approximer les profils des variables dynamiques et du coefficient de diffusion par des profils exponentiels. On distingue en général le coefficient de diffusion vertical du coefficient de diffusion horizontal (comme dans les modèles gaussiens) :

$$u = az^p \quad (\text{II.17})$$

$$K_z = bz^n \quad (\text{II.18})$$

$$\sigma_y = c + dx^e \quad (\text{II.19})$$

Où x est la distance à la source.

Finalement, le profil logarithmique du vent sera conservé car peu différent du profil exponentiel. Les valeurs de K_z provenant de la modélisation de Held sont nettement inférieures à celle obtenues par la loi linéaire établie initialement. A défaut de critère objectif, la loi linéaire est conservée.

Enfin, en ce qui concerne la diffusion latérale, l'hypothèse d'un champ de vent constant permet de formuler une équivalence entre le coefficient de Held et le coefficient de diffusion latéral :

$$\sigma_y^2 = \frac{2K_y x}{u} \quad (\text{II.20})$$

Avec : $c=3$; $d=0.32$ et $e=0.78$

On modélise alors la diffusion turbulente par le coefficient K_{diff} [17] défini par :

$$K_{diff} = \max(K_{z,lin}; K_{y,held}) = K_x = K_y = K_z \quad (\text{II.21})$$

$$\text{avec } K_{z,lin} = \rho u_* k(z + z_0) \quad (\text{II.22})$$

$$\text{et } K_{y,held} = \frac{u_*}{2kx} \ln\left(\frac{z+z_0}{z_0}\right) (c + dx^e)^2 \quad (\text{II.23})$$

5. Modélisation de la dispersion atmosphérique

A l'heure actuelle il existe trois grandes catégories de modèles de dispersion atmosphérique.

- **les modèles Lagrangiens** : ils sont basés sur l'intégration dans le temps et dans l'espace des équations fondamentales de la mécanique de fluides.
- **les modèles Eulériens** : ils sont basés sur l'intégration dans le temps des équations fondamentales de la mécanique des fluides.
- **les modèles Gaussiens** : ils sont basés sur la solution gaussienne de l'équation de l'advection diffusion.

Chacun de ces modèles est adapté à des conditions de topographie particulière et une gamme de polluants atmosphériques plus ou moins large. Ces modèles diffèrent par leur complexité et leur facilité de mise en œuvre et par le fait qu'ils nécessitent des données d'entrées variables.

Les premiers modèles de dispersion utilisés sur ordinateur sont de type gaussien. Leurs origines remontent aux travaux de Sutton, de Pasqual et en France de Doury.

5.1. Modèles de dispersion atmosphérique

Les modèles de dispersion sont couramment utilisés pour l'évaluation des impacts des sources de pollution atmosphérique, la conception des réseaux d'échantillonnage, le calcul de concentrations en air ambiant etc. leur emploi demande cependant une certaine uniformisation afin que les résultats puissent être utilisés ou analysés le mieux possible. Il y a trois modèles de dispersion atmosphérique : Modèles Gaussien, Modèles Lagrangiens (ou de trajectoire), Modèles Eulériens.

5.1.1 Modèles Lagrangiens (ou de trajectoire)

Les modèles de type lagrangien étudient le transport des polluants atmosphériques dans un système de coordonnées en mouvement. Dans sa forme la plus générale, la caractéristique principale de ce type de modèle consiste à définir une colonne d'air verticale (hypothétique, avec une section transversale qui est en contact avec le sol), la quelle se déplace horizontalement à la vitesse moyenne du vent, en additionnant les polluants par le fond de la colonne.

Compte tenu que la vitesse et la direction du vent est différente en haut et au pied de la colonne, celle-ci est déviée de la verticale (vitesse moyenne du vent constante tout le long de la colonne).

En fait, il ne s'agit plus ici de considérer un nuage de molécules dans son ensemble mais chaque molécule est prise individuellement. Cette approche consiste donc à suivre, au sens lagrangien, une molécule individuelle dans son mouvement et à reconstituer sa trajectoire en tenant compte de l'interaction avec l'écoulement du fluide. Enfin, le traitement statistique d'un grand nombre de trajectoires permet d'obtenir des informations sur la diffusion, la concentration et la distance de dispersion en valeur moyenne [18].

5.1.2 Modèles Eulériens

Contrairement à l'approche lagrangienne, ici l'observateur est fixé en un point et examine les grandeurs physiques du fluide qui passent au point d'observation. La première formulation eulérienne pour les écoulements diphasiques, dont la phase dispersée ne constitue pas un continu un connecté (c'est le cas en particulier pour des particules solides dans l'air) mais dont le fluide porteur est continu, Bien que l'approche eulérienne semble moins naturelle que la description lagrangienne pour traiter le transport des molécules, elle correspond souvent à une réalité expérimentale, L'approche eulérienne est couramment utilisée pour la simulation d'écoulements gaz-solides dilués et peut être mise en œuvre à l'aide de plusieurs considérations [19].

Le modèle eulérien monophasique s'appuie sur le principe que les molécules se comportent comme un scalaire passif, au sein de l'écoulement. Cette hypothèse est admise lorsque :

- les molécules considérées ont une masse volumique beaucoup plus grande que celle du fluide et ont un diamètre inférieur ou du même ordre que les plus petites échelles de la turbulence (échelle de Kolmogorov).
- le nombre de Stokes est bien inférieur à l'unité, c'est-à-dire que le temps de relaxation des molécules est petit devant l'échelle de temps de la turbulence.

Ces conditions impliquent que la présence des molécules n'a pas d'effet sur la turbulence de l'écoulement du fluide porteur. D'autre part, que les effets d'inertie des molécules (et de façon plus générale, les effets diphasiques) sont négligeables : la réponse des molécules aux accélérations du mouvement turbulent du fluide porteur est parfaite, et la vitesse relative entre la phase fluide et la phase dispersée est égale à la vitesse de sédimentation. La phase moléculaire et la phase fluide sont donc découplées. La démarche à suivre consiste alors à résoudre les champs aérodynamiques (vitesse, turbulence...) du fluide porteur dont la solution permet de traiter les molécules.

5.1.3 Modèles Gaussien

5.1.3.1 Présentation

Les équations régissant le phénomène de la dispersion peuvent être résolues en faisant les hypothèses suivantes :

- On peut établir une relation simple entre la diffusion par turbulence et le gradient moyen de concentration ;
- Il est possible de négliger la diffusion moléculaire de 10^3 à 10^4 fois inférieure à la diffusion turbulente ;
- Le champ de vent est uniforme dans l'espace et dans le temps ;
- La turbulence est homogène et isotrope.

Dans ce cas, une solution de l'équation de dispersion est une loi de distribution gaussienne dans l'espace : c'est le modèle gaussien. Ces modèles sont assez bien adaptés :

- Aux conditions météorologiques moyennes.
- Aux distances supérieures à 100 m de la source,
- Aux nuages ne s'éloignant pas trop du sol (à cause des cisaillements verticaux de l'atmosphère en altitude),
- Aux topographies ne présentant pas d'obstacles et même, en général, de relief.

La précision des résultats que l'on obtiendra avec les modèles de type gaussien peut être de l'ordre d'un facteur 10 sur les concentrations et d'un facteur 3 sur les distances (facteur en générale majorant). La précision des résultats est liée au type de modèle utilisé mais aussi à l'adéquation de ce modèle utilisé mais aussi à l'adéquation de ce modèle avec le problème à traiter [20, 21].

Les modèles gaussiens (modèles de panache) sont des modèles eulériens statistiques, couramment utilisés pour la prédiction de la dispersion des polluants atmosphériques. Ces modèles supposent que la distribution moyenne dans l'espace de la concentration émise par une source ponctuelle est décrite par une courbe gaussienne (Figure II-9).

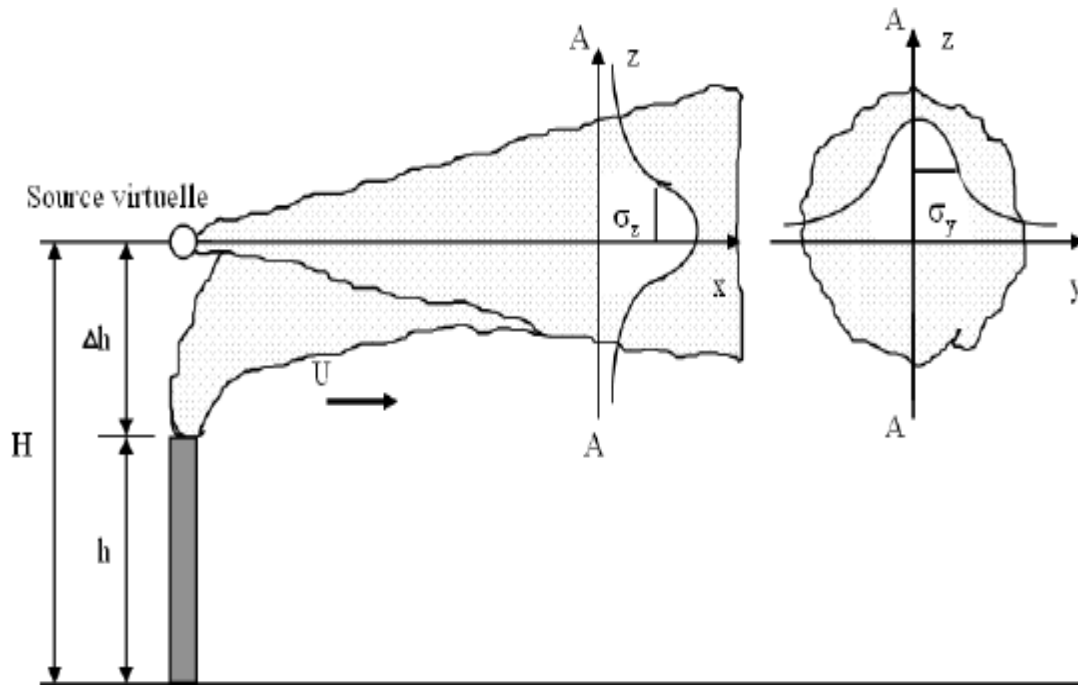


Figure II-9 : illustration de la diffusion suivant le modèle de panache : modèle gaussien [1].

Pour un système de coordonnées cartésiennes, avec l'axe des x orienté dans la direction du vent, l'équation (II.4) admet une solution :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right) \cdot \left[\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H(x)}{\sigma_z}\right)^2\right) + \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H(x)}{\sigma_z}\right)^2\right)\right] \quad (\text{II.24})$$

Cette équation exprime que l'évolution de la concentration dans le temps et dans l'espace est représentée par une courbe gaussienne, qui décrit l'étalement de la matière Q (g/s) (le débit) initialement introduite de façon ponctuelle.

U est la vitesse moyenne à la hauteur H dans la direction de l'écoulement, considérée comme constante. Une source imaginaire est placée en H pour une paroi imperméable et réfléchissante. La différence fondamentale entre cette description du champ moyen de concentration et l'équation (II.4) est dans la signification physique de σ_y et σ_z qui exprime ici la diffusion turbulente du nuage suivant les directions y et z . Ils dépendent donc des caractéristiques de l'écoulement, de la turbulence de la stabilité de l'atmosphère et de rugosité de la surface. Aussi, la difficulté majeure de ces modèles réside dans la formulation des expressions des écarts-types du panache en fonction des conditions locales de l'écoulement [1].

Dans l'équation (II.24), on néglige la diffusion turbulente selon x , dans le sens de l'écoulement, au profit du transport advectif et on introduit les écarts-types de la distribution, horizontale et verticale, respectivement σ_y et σ_z .

Les deux principales formulations des écarts-types de dispersion, édictées par Briggs et Doury sont présentées ci-après.

a. Formulation de Briggs

La formulation des écarts-types σ_y et σ_z proposée par Briggs est dépendante de la classe de stabilité de Pasquill considérée. Pour une dispersion en milieu rural ou en milieu urbain, on considère ainsi les formules suivantes, où x est la distance à la source [6].

Les formules de Briggs font partie des paramétrisations « ancienne génération » qui dépendent des classes de stabilité de Pasquill. Parmi les autres paramétrisations de ce type couramment utilisées, on peut citer les écarts types de Pasquill-Guifford. Les formules de Briggs sont une tentative de synthétiser différentes paramétrisations existantes, en les interpolant pour des terrains ruraux ou urbains. Les écarts types de Briggs sont donnés sous la forme générale :

$$\sigma_y = \frac{\alpha x}{\sqrt{1+\beta x}} \quad (\text{II.25})$$

$$\sigma_z = \alpha x(1 + \beta x)^\gamma \quad (\text{II.26})$$

Avec x la distance à la source dans la direction du vent, et α , β et γ des coefficients dépendant de la classe de stabilité. Le tableau II-3 donne les formules pour le cas rural et les terrains urbains.

Tableau II-3 : Formulation des écarts-types de la dispersion par Briggs pour le cas rural.

Classe de pasquill	$\sigma_y(\text{m})$	$\sigma_z(\text{m})$
Dispersion en milieu rural		
A	$0.22x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.20x$
B	$0.16x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.12x$
C	$0.11x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.08x(1+0.0002x)^{-0.5}$
D	$0.08x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.06x(1+0.0015x)^{-0.5}$
E	$0.06x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.03x(1+0.0003x)^{-1}$
F	$0.04x(1+0.0001x)^{-0.5}$	$0.016x(1+0.0003x)^{-1}$

A : très instable ; B : instable ; C : peu instable ; D : neutre ; E : stable ; F : très stable

Tableau II-4 : Formulation des écarts-types de la dispersion par Briggs pour le cas urbain [5].

Classe de pasquill	$\sigma_y(m)$	$\sigma_z(m)$
Dispersion en milieu urbain		
A-B	$0.32x(1+0.0004x)^{-0.5}$	$0.24x(1+0.001x)^{-0.5}$
C	$0.22x(1+0.0004x)^{-0.5}$	$0.20x$
D	$0.16x(1+0.0004x)^{-0.5}$	$0.14x(1+0.0003x)^{-0.5}$
E-F	$0.11x(1+0.0004x)^{-0.5}$	$0.08x(1+0.0015x)^{-0.5}$

A : très instable ; B : instable ; C : peu instable ; D : neutre ; E : stable ; F : très stable

Cette paramétrisation étant établie à partir des expériences de Prairie Grass, l'adéquation entre ce modèle de panache gaussien et les mesures expérimentales sont généralement satisfaisantes. Pour laquelle la paramétrisation de Briggs en milieu rural a été utilisée.

b. Formulation de Doury

La formulation proposée par Doury, établie historiquement pour les besoins des autorités de sûreté nucléaire françaises [6], se distingue en deux classes en fonction de l'intensité de la diffusion verticale mais n'est pas directement liée à la stabilité de l'atmosphère. La dispersion verticale est ainsi considérée comme faible lorsque le gradient vertical de température excède $-5^\circ\text{C}/\text{km}$. Au contraire, on la qualifie de normale pour des variations de température inférieures. Les écarts-types σ_y et σ_z obéissent aux relations suivantes :

$$\sigma_y = (K_y t)^{\alpha_y} \quad (\text{II.27})$$

$$\sigma_z = (k_z t)^{\alpha_z} \quad (\text{II.28})$$

Où t est le temps de transport depuis la source, relié à la distance à la source à travers la vitesse du vent supposé uniforme et K_y et K_z sont les coefficients de diffusivité turbulente respectivement latéral et vertical [6].

Les paramétrisations proposées par Doury sont rassemblées dans le tableau suivant (Tableau II-5).

Tableau II-5 : Paramétrisation de la dispersion par Doury, en diffusion normale et faible [22].

	Temps de transport (s)	$K_y(m^2/s)$	$K_z(m^2/s)$	α_y	α_z
Diffusion normale	0 à 240	0.405	0.42	0.859	0.814
	240 à 3280	0.135	1	0.13	0.685
	3280 à 97000	0.135	20	0.13	0.5
	97000 à 508000	0.463	20	1	0.5
	508000 à 1300000	6.5	20	0.824	0.5
	>1300000	200000	20	0.5	0.5
Diffusion faible	0 à 240	0.405	0.20	0.859	0.5
	240 à 3280	0.135	0.20	0.13	0.5
	3280 à 97000	0.135	0.20	0.13	0.5
	97000 à 508000	0.463	0.20	1	0.5
	508000 à 1300000	6.5	0.20	0.824	0.5
	>1300000	200000	0.20	0.5	0.5

5.1.3.2 Avantages du modèle gaussien

Le modèle gaussien présente un ensemble d'avantages qui lui confère une place importante dans le domaine de modélisation de la dispersion des polluants atmosphérique. Ces avantages peuvent être résumés comme suit:

- Simplicité d'utilisation : il suffit de disposer des caractéristiques des émetteurs des données météorologiques fondamentales (vitesse et direction du vent).
- Temps de calcul court : parmi les raisons fondamentales de son utilisation massive, vu qu'il permet de donner dans des temps extrêmement courts une idée sur l'état de dispersion des polluants.
- Les données d'entrée nécessaires sont disponibles la plupart du temps
- Validité des résultats sur des terrains sans relief important qui sont souvent compétitifs par rapport à ceux obtenus avec des modèles plus sophistiqués [1].

5.2. Sur-hauteur d'un panache chaud

5.2.1. Schématisation de la sur-hauteur d'un panache chaud

Dans le cas de rejets beaucoup plus chauds que la température de l'air ambiant, ou émis avec une vitesse d'éjection importante, le panache atteint une certaine hauteur avant d'avoir un comportement identique à l'air ambiant et avant de satisfaire les équations de transport précédemment décrites. Cette différence entre la hauteur d'éjection et la hauteur finale atteinte par le panache s'appelle la sur-hauteur (« plume rise »), et peut être importante (de l'ordre de plusieurs centaines de mètres). Des formules empiriques simples

fournissent une estimation de la sur-hauteur en fonction de la hauteur initiale, du diamètre de la source, de la température et de la vitesse d'éjection du fluide émis. Elles fournissent toutes une estimation de la hauteur finale du panache, en supposant qu'elle est atteinte instantanément à la sortie de la source, avant tout déplacement horizontal du panache (figure II-10) [5].

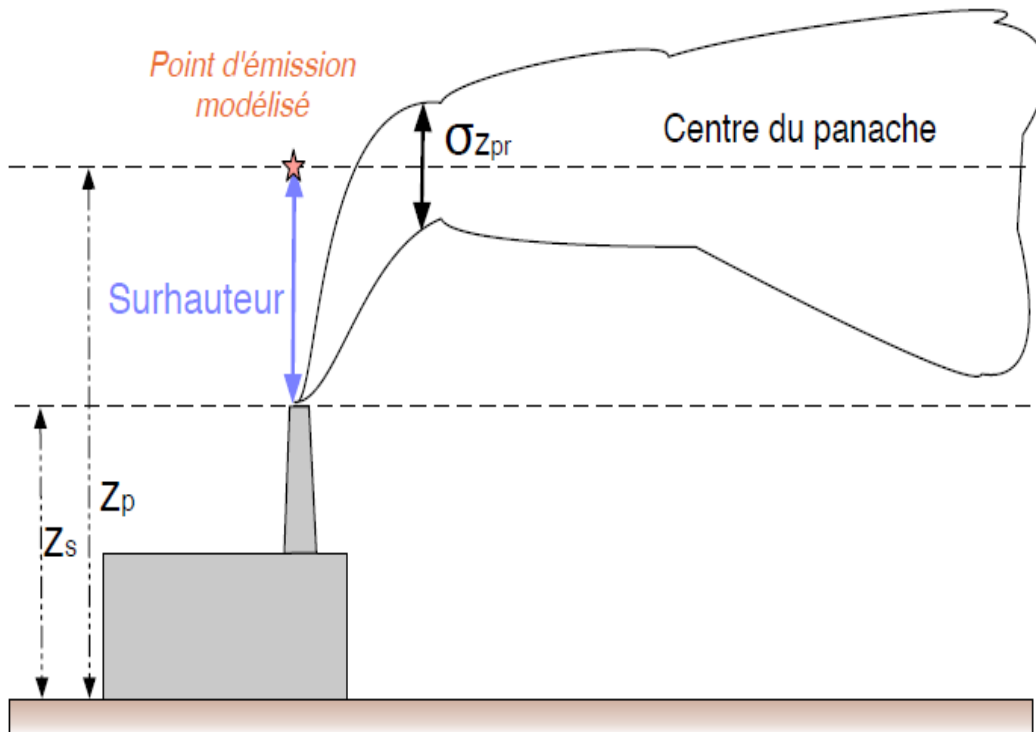


Figure II-10 : Représentation d'une source en hauteur [4].

Z_s : est la hauteur de source,

Z_p : est la hauteur effective du panache, en tenant compte de la surhauteur.

On modélise l'émission à la hauteur Z_p , en négligeant le déplacement horizontal du panache avant d'atteindre cette hauteur.

σ_{zpr} : est la largeur initiale du panache.

Δh : est la sur-hauteur

$Z_p = Z_s + \Delta h$: est la hauteur finale atteinte.

De plus, l'élargissement du panache pendant cette phase d'élévation est représentée par un terme additionnel dans le calcul des écarts types [5].

$$\sigma_{ypr} = \frac{\Delta h}{3.5} \quad (\text{II.29})$$

$$\sigma_{zpr} = \frac{\Delta h}{2} \quad (\text{II.30})$$

5.2.2. formules de Briggs de la Sur-hauteur d'un panache chaud

Des estimations différentes sont données suivant que la sur-hauteur est principalement due à la vitesse d'éjection, ou à la flottabilité (c'est-à-dire à la différence de température avec l'air ambiant).

- Classes de bonne diffusion : A, B, C, D

A : très instable ; B : instable ; C : peu instable ; D : neutre ;

$$\Delta H = 38.71 \frac{(gwd^2\Delta T/(4T_s))^{3/5}}{\bar{U}} \quad (\text{II.31})$$

Où :

ΔH : Sur-hauteur (m).

w : vitesse de sortie des gaz ($m.s^{-1}$).

\bar{U} : vitesse du vent à la hauteur de la cheminée ($m.s^{-1}$).

d : diamètre de la cheminée (m).

T_s : température des gaz à la sortie de la cheminée (K).

ΔT : écart de température entre l'air et T_s (K).

g = l'accélération gravitationnelle ($m.s^{-2}$).

- Classes stables : E et F

E : stable ; F : très stable ; => Le panache est gêné dans son élévation [4]

$$\Delta H = 2.6 \frac{(gwd^2\Delta T/(4T_s))^{1/3}}{s\bar{U}} \quad (\text{II.32})$$

$$s = \frac{g \frac{\partial \theta}{\partial z}}{T_{air}} \quad (\text{II.33})$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0.02K/m \text{ pour la classe E}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0.035K/m \text{ pour la classe F}$$

6. Simulation et résultats

6.1. La sur-hauteur en fonction du vent et de la stabilité

Pour calculer la sur-hauteur en fonction de la vitesse du vent et de la stabilité, nous avons effectué la simulation sous MatLab Version 9.01 des équations (II.31), (II.32) et (II.33) avec les données de la cheminée du complexe GL1K suivantes :

$d=1.0668 \text{ m}$; $w=10.1 \text{ m/s}$ $T_s=353K$ $T_{air}=298K$

On obtient des résultats indiqués sur le tableau suivant :

Tableau II-6 : sur-hauteur en fonction du vent et de la stabilité

U [m/s]	U=1.5	U=2	U=2.77	U=4	U=6	U=9.5	U=15
$\Delta h(A-D)$ [m]	62.710	47.033	33.958	23.516	15.677	9.901	6.271
$\Delta h(E)$ [m]	0.0019	0.0014	0.0010	0.0007	0.0005	0.0003	0.0002
$\Delta h(F)$ [m]	0.0033	0.0025	0.0018	0.0012	0.0008	0.0005	0.0003

6.2. Les écarts types en fonction du vent et de la stabilité :

Pour calculer les écarts types en fonction du vent et de la stabilité, nous avons effectué la simulation des équations précédente (II.29) et (II.30) avec les mêmes données précédentes de la cheminée. Les résultats sont illustrés sur les tableaux II-7, II-8 et II-9 :

Tableau II-7 : les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(A-D)$.

U [m/s]	U=1.5	U=2	U=2.77	U=4	U=6	U=9.5	U=15
σ_y [m]	17.917	13.438	9.7026	6.7190	4.4793	2.8291	1.7917
σ_z [m]	31.355	23.516	16.979	11.758	7.8389	4.9509	3.1355

Tableau II-8 : les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(E)$.

U [m/s]	U=1.5	U=2	U=2.77	U=4	U=6	U=9.5	U=15
σ_y [10^{-3} m]	0.5340	0.4005	0.2892	0.2002	0.1335	0.0843	0.0534
σ_z [10^{-3} m]	0.9345	0.7008	0.5060	0.3504	0.2336	0.1475	0.0934

Tableau II-9 : les écarts types en fonction du vent et de la stabilité pour $\Delta h(F)$.

U [m/s]	U=1.5	U=2	U=2.77	U=4	U=6	U=9.5	U=15
σ_y [10^{-3} m]	0.9345	0.7008	0.5060	0.3504	0.2336	0.1475	0.0934
σ_z [m]	0.0016	0.0012	0.0009	0.0006	0.0004	0.0003	0.0002

- **Discussion des résultats**

D'après le tableau II-6, on remarque clairement que la sur-hauteur Δh diminue avec l'augmentation de la vitesse du vent pour les trois cas du nuage stable, neutre et instable.

D'après les tableaux (II-7, II-8 et II-9), on remarque clairement aussi que les écarts types selon les axes x et y diminuent avec l'augmentation de la vitesse du vent pour les trois cas cités plus.

6.3. Variation de la concentration

Pour étudier l'influence de la distance y sur la concentration $C(x, y, z)$, nous avons réalisé l'application de la méthode de chimie-transport « l'équation de dispersion réactive », on considère le modèle gaussien décrit sur l'équation (II.24) a été résoudre à partir de l'équation de dispersion advective (II.4) pour quatre distances différentes et pour une dispersion du nuage instable dans un site industriel (GL1K) de skikda, en décembre 2013.

Nous avons effectué la simulation pour les données suivantes :

$y = 100$ m;

avec les données de la torche du (GL1K) suivantes :

Le débit $Q=4548.611$ g/s ;

La vitesse moyenne du vent $U=2.77$ m/s ;

Les écart-type suivant l'axe horizontal et vertical σ_y et σ_z sont définis par les deux formule (II.29) et (II.30)

La hauteur de la torche $z=150$ m ;

La variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la distance est indiquées sur la figure II-11, et met en évidence l'influence de la distance y sur la concentration $C(x,y,z)$.

La variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la sur-hauteur est indiquées sur les figures : II-12(a, b, c, d) et met en évidence l'influence de la sur-hauteur ΔH sur la concentration $C(x,y,z)$.

La concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la sur-hauteur et différentes valeurs de la distance y est présentées sur la figure II-13 et met en évidence l'influence de la sur-hauteur ΔH et la variation de la distance y en même temps sur la concentration $C(x,y,z)$.

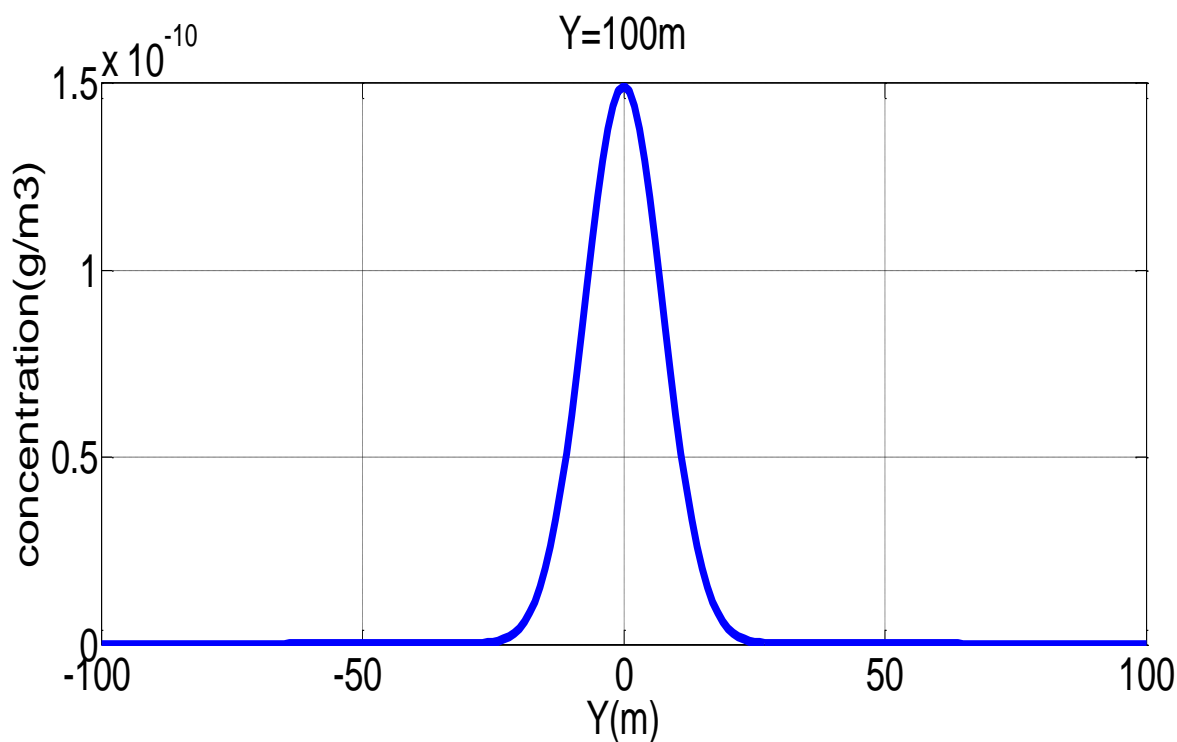


Figure II-11 : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, la hauteur de la source $z=150$ m

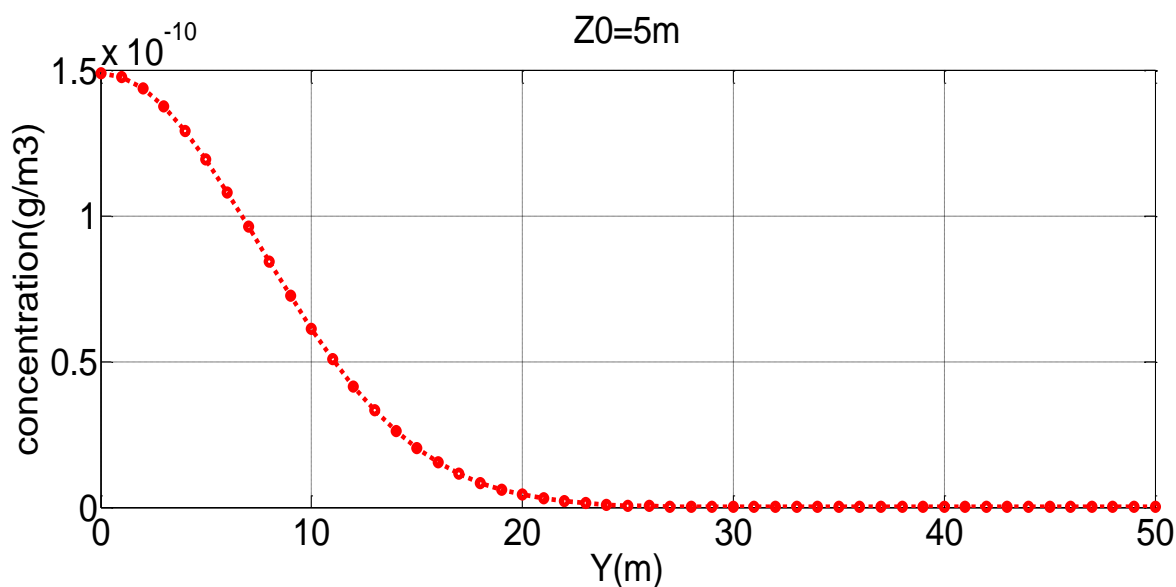


Figure II-12(a) : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur $Z_0=5$ m; la hauteur de la source $z=150$ m

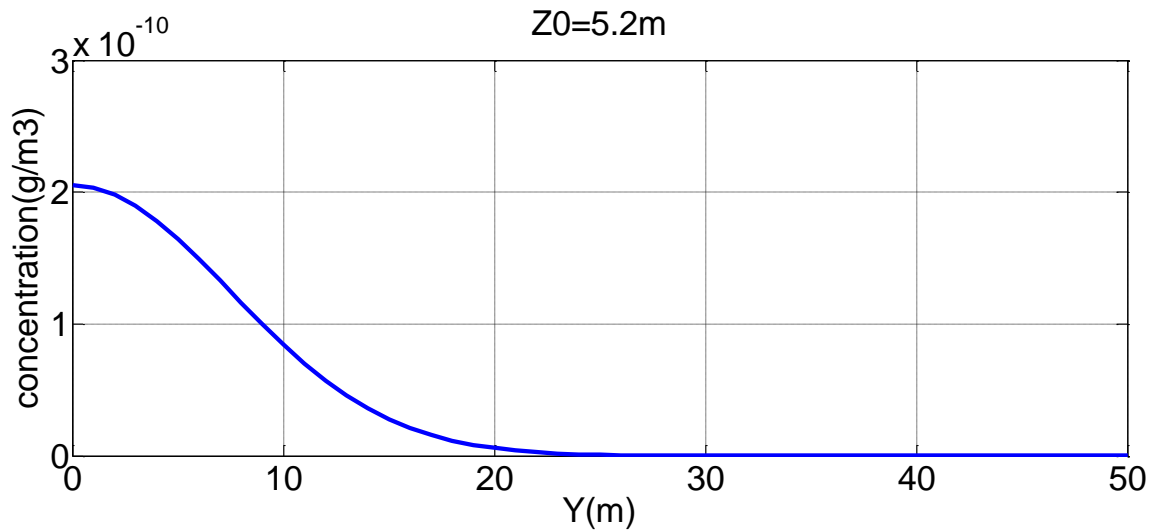


Figure II-12(b) : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur Z0=5.2m; la hauteur de la source z=150m

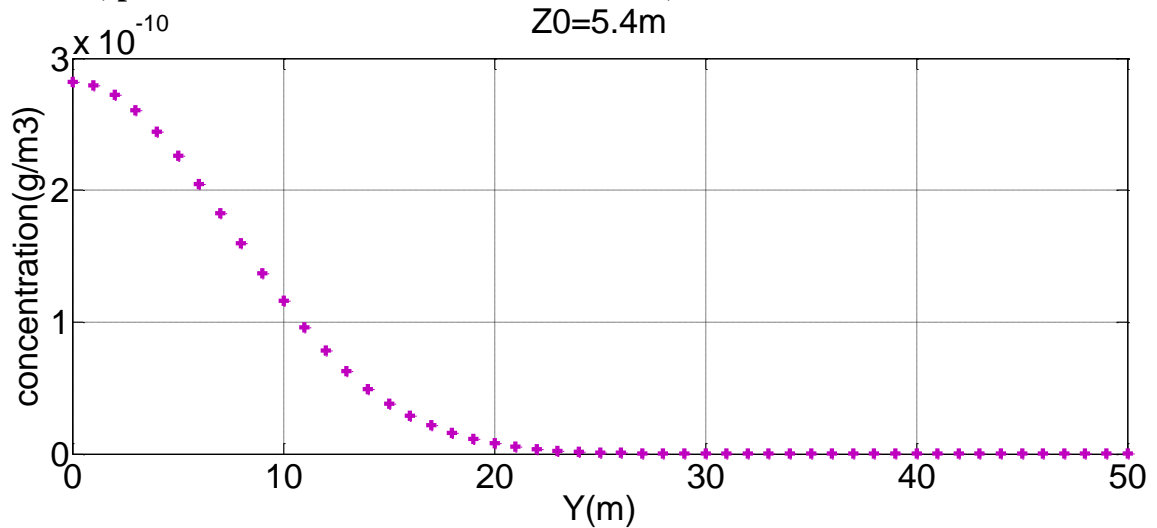


Figure II-12(c) : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour valeurs de la sur-hauteur Z0=5.2m; la hauteur de la source z=150m

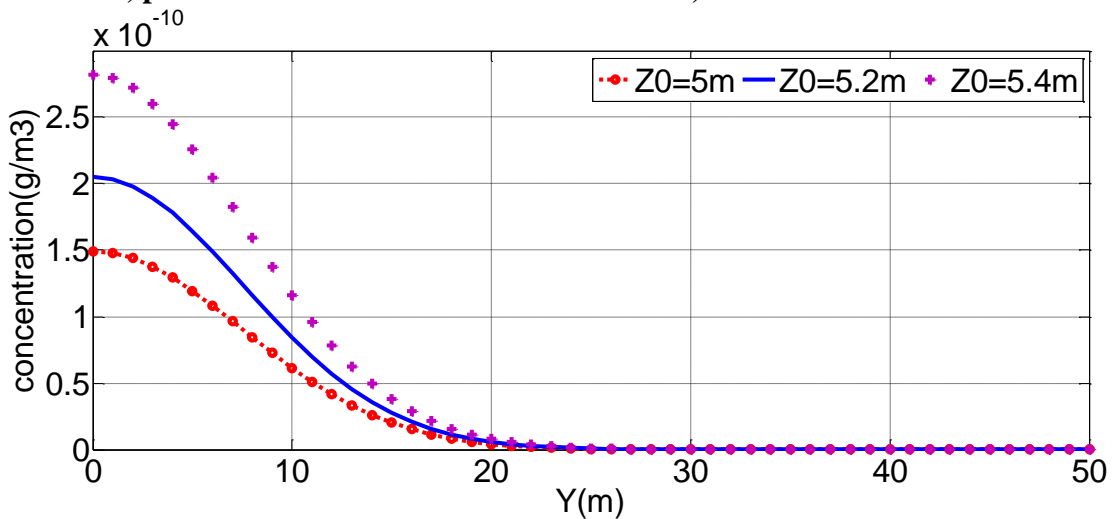


Figure II-12(d) : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la sur-hauteur; la hauteur de la source z=150m

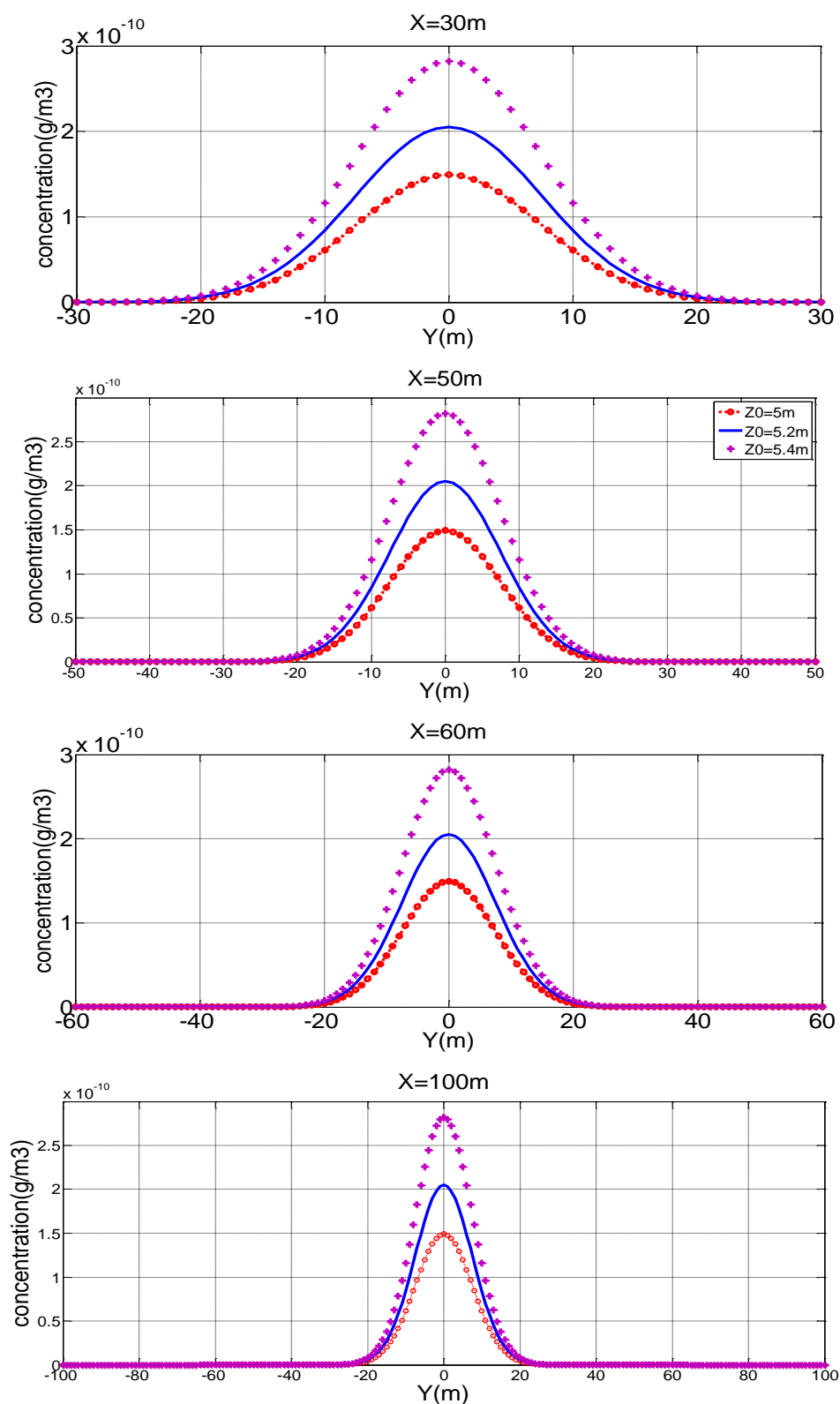


Figure II-13 : variation de la concentration au sol en fonction de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la distance x et de la sur-hauteur ; la hauteur de la source $z=150\text{m}$

6.4. Variation de la sur-hauteur de nuage en fonction de la vitesse du vent

Pour étudier l'influence de la vitesse du vent sur la sur-hauteur Δh , nous avons effectué la simulation des équations (II.31), (II.32) et (II.33) avec plusieurs valeurs de la vitesse du vent pour une dispersion du nuage stable, neutre et instable dans un site industriel (GL1K), les résultats obtenus sont illustrés sur la figure (II-14).

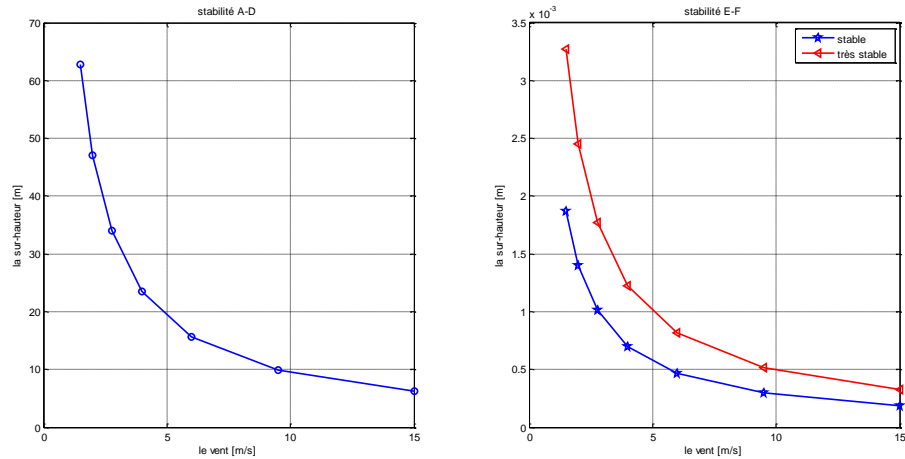


Figure II-14 : Evolution de la sur-hauteur de nuage z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage stable, neutre et instable.

6.5. Variation des écarts-types de nuage en fonction de la vitesse du vent :

Pour étudier l'influence de la vitesse du vent sur les écarts-types σ_y et σ_z , nous avons effectué la simulation sous MatLab Version 9.01 des équations (29) et (30) avec plusieurs valeurs de la vitesse du vent pour une dispersion du nuage stable, neutre et instable dans un site industriel (GL1K), les résultats obtenus sont illustrés sur les figures (II-15), (II-16), (II-17) :

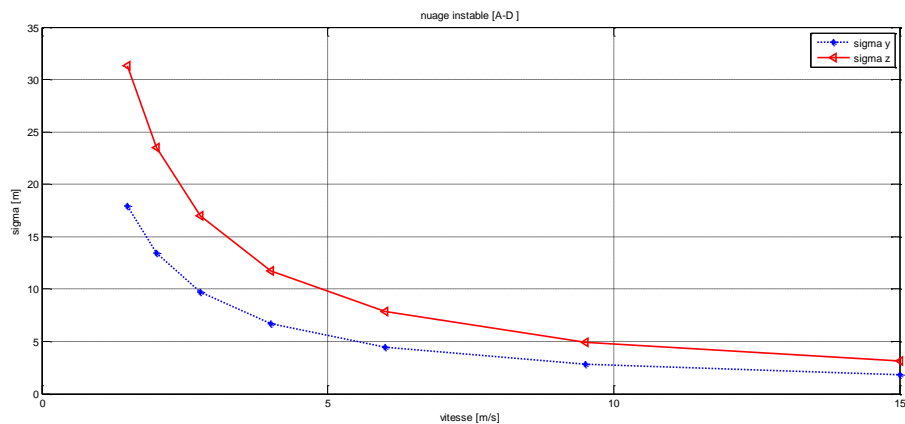


Figure II-15 : variation de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage instable (A-D)

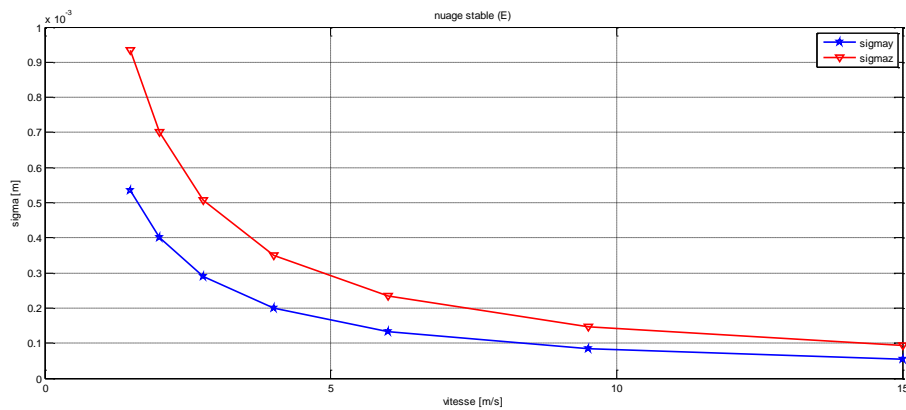


Figure II-16 : variation de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage stable (E)

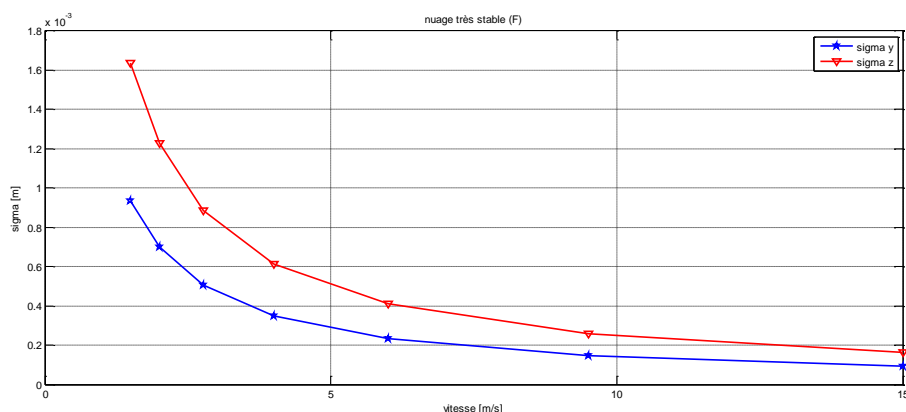


Figure II-17 : variation de l'écart type σ_y et σ_z en fonction de la vitesse du vent pour un nuage très stable (F)

- **Discussion des résultats**

On remarque clairement l'augmentation de la concentration avec la diminution de la distance y à la source, pour différentes valeurs de la distance (voir la figure : II-11), et la concentration varie suivant z_0 c'est-à-dire la concentration augmente avec l'augmentation des valeurs de la sur-hauteur (voir la figure : II-12). La concentration augmente ainsi également dans le cas d'une distance y à la source faible et une sur-hauteur z_0 importante (voir la figure : II-13)

À partir des résultats de la figure II-14, on constate que la sur-hauteur de nuage varie inversement à la vitesse du vent pour un nuage stable, neutre et instable c'est-à-dire que la sur-hauteur augmente pour une faible vitesse du vent et diminue pour une forte vitesse du vent. Les écarts-types selon l'axe y et z varient proportionnellement avec la sur-hauteur et inversement à la vitesse du vent. Ceci est vérifié dans tous les cas sur les figures II-15, II-16 et II-17 pour les différents types du nuage instable, stable et très stable.

7. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié et analysé l'évolution de la concentration des polluants dégagés par la torche d'un site industriel (le complexe GL1K-Skikda) par la méthode de la modélisation de dispersion réactive du modèle Gaussien (Equation de type advection-diffusion –réaction). La résolution de cette équation s'est basée sur les modèles de chimie-transport (CTM Chemistry Transport Models en anglais). De tels modèles sont la base des systèmes modernes de modélisation de la qualité de l'air.

A partir des résultats de la simulation, nous avons constaté dans tous les cas et à chaque fois que le suivi de pollution par la méthode de l'équation de dispersion atmosphérique, précisément la résolution par la méthode du modèle gaussien est très puissante pour détecter et assurer le suivi de la concentration des polluants dans l'espace.

Références 2

- [1] A. Khlaifi. Estimation des sources de pollution atmosphérique par modélisation inverse. Thèse Doctorat de l'université de Paris XII, France. 2007.
- [2] B. Sportisse. La pollution atmosphérique des processus à la modélisation. 2008.
- [3] Y. Roustan. Modélisation de la dispersion atmosphérique du mercure, du plomb et du cadmium à l'échelle européenne. Thèse Doctorat de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, France. 2007.
- [4] H. Schmitt-Foudhil. La dispersion atmosphérique. Module environnement atmosphérique et qualité de l'air, cours CERE. Paris. 2010.
- [5] I. Korsakissok. Changements d'échelle en modélisation de la qualité de l'air et estimation des incertitudes associées. Thèse Doctorat de l'Université Paris-Est. 2009.
- [6] M. Krysta. Modélisation numérique et assimilation de données de la dispersion de radionucléides en champ proche et à l'échelle continentale. Thèse Doctorat de l'Université Paris XII - Val de Marne. 2006.
- [7] F. Vender. Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de site industriel. Thèse de doctorat de l'Université de Lyon, France. 2011.
- [8] C. Seigneur. Modélisation de la pollution atmosphérique. SGE Dispersion atmosphérique. Cours. Master SGE. Ecole des ponts et chaussées. Paris. 2009.
- [9] M. Jacobson. Fundamentals of atmospheric modeling. Cambridge University Press Oxford. 1999.
- [10] P. Drobinski. Dynamique de la couche limite atmosphérique : de la turbulence aux systèmes de meso-échelle. Thèse de doctorat Université de pierre et marie Curie-Paris VI. 2005.
- [11] G. Sporta. Théories et méthodes de la statistique, Dunod, Paris. 14-17. 1995.
- [12] A. Avila, A. Lonescu, I. Colda et E. Mayer. Contribution à la détermination des sources de la pollution atmosphérique à partir des données d'un réseau de mesure. I. Validation expérimentale du modèle. Colloque Pollution atmosphérique à l'échelle locale et régionale. Cachan. France. 21-30. 1993.
- [13] S. Hanna. Air Quality Modelling Over Short Distance, John Wiley and sons Inc. 1985.
- [14] S. Hanna et B. Egan. A complex terrain dispersion model for regulatory applications at the West vaco Luke Mille, Atmospheric Diffusion, Rapport technique, Department of Energie. 1984.

Références du chapitre II

- [15] M. Smith et T. Frankenberg. Improvement of ambient sulfur dioxide concentrations by conversion from low to high stacks, *Journal of applied Meteorology*. 25(6):595-601. 1975.
- [16] A. Ung. Cartographie de la pollution atmosphérique en milieu urbain à l'aide des données multi sources. Thèse de doctorat, Université Denis Diderot – Paris VII. 2003.
- [17] B. Albriet. Modélisation numérique des aérosols à l'échelle locale. Thèse Doctorat de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Paris. 2007.
- [18] J. Pozorski et J.-P. Minier. On the lagrangian Turbulent Dispersion Models based on The Langevin Equation, *Int. J. Multiphase flow*, 24:913-945. 1998.
- [19] C. Crowe, T. Troutt et J. Chung. Numerical models for two phase turbulent flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 28: 11-43. 1996.
- [20] F. Pasquill, et F. Smith. Study of the dispersion of windborne material from industrial and other sources. Ed. Ellis Horwood, Chichester, England. 1983.
- [21] S. Hanna et J. Chang. Boundary-layer parameterizations for applied dispersion modeling over urban areas, *Bound.-Layer Meteorol.*, 58:229-259. 1992.
- [22] Y. Belot, A. Baille et J-L. Delmas. Modèle numérique de dispersion des polluants atmosphériques en présence de couverts végétaux. *Atmospheric Environment*. 10 :89-98. 1975.

Chapitre III

Les réseaux de neurones artificiels

1. Introduction :

Un réseau de neurones artificiel (ou *Artificial Neural Network* en anglais) est un modèle de calcul dont la conception est très schématiquement inspiré du fonctionnement de vrais neurones humains [1]. Les réseaux de neurones artificiel (RNA) sont considérés par certains comme un outil statistique et par d'autres comme une technique d'intelligence artificielle ; ils permettent de traiter des problèmes, complexes, en s'appuyant davantage sur la perception que sur le raisonnement logique formel [2, 3].

Depuis une vingtaine d'années, ces réseaux ont fait l'objet de multiples études vu leur capacité à résoudre des problèmes non linéaires et très complexes à multiple entrées et sorties, par simple apprentissage à partir des exemples. Ils ont beaucoup d'avantages qui font d'eux un outil puissant d'approximation des fonctions et une méthode simple de modélisation des systèmes non linéaires [4, 5]. Les réseaux de neurones sont très utilisés pour la classification, l'estimation, la prédiction, la segmentation, exploités et fusion de données [6].

Dans ce chapitre nous abordons dans le détail les réseaux de neurones en mettant l'accent sur les trois modèles que nous exploiterons dans notre travail. Le chapitre comprend également un état de l'art sur l'exploitation des RNA dans le suivi de la pollution atmosphérique.

2. Historique

Les premières recherches remontent à la fin du 19^{ème} et au début du 20^{ème} siècle, et consistent en divers travaux en physique, en psychologie et en neurophysiologie menés par des scientifiques tels que 'Hermann Von Helmholtz', 'Ernst Mach et Ivan Pavlov' [7, 8]. A cette époque, il s'agissait de théories plutôt générales sans modèle mathématique précis d'un neurone. La naissance du domaine des réseaux de neurones artificiels remonte aux années 1940 avec les travaux de Warren McCulloch et Walter Pitts.

W.Mc Culloch et W.Pitts laissent leurs noms à une modélisation du neurone biologique (un neurone au comportement binaire) en 1943. Ceux sont les premiers à montrer que des réseaux de neurones formels simples peuvent réaliser des fonctions logiques, arithmétiques et symboliques complexes (tout au moins au niveau théorique).

D.Hebb, physiologiste américain, a proposé une théorie fondamentale pour l'apprentissage en 1949. La règle qu'il propose connue sous le nom de règle de Hebb, est presque partout présente dans les modèles actuels, même les plus sophistiqués [1, 3, 7, 8, 9].

F.Rosenblatt développe le modèle du perceptron en 1954. Il construit le premier neuro-ordinateur basé sur ce modèle et l'applique au domaine de la reconnaissance de formes.

B.Widrow, un automaticien, développe le modèle Adaline (Adaptive Linear Element) en 1960. Dans sa structure, le modèle ressemble au perceptron, cependant la loi d'apprentissage est différente. Celle-ci est à l'origine de l'algorithme de rétropropagation du gradient très utilisé aujourd'hui avec les perceptrons multicouches.

M. Minsky et S. Papert publient un ouvrage qui met en exergue les limitations théoriques du perceptron en 1969. Limitations alors connues, notamment concernant l'impossibilité de traiter par ce modèle des problèmes non linéaires. Ils étendent implicitement ces limitations à tous les modèles de réseaux de neurones artificiels. Leur objectif est atteint, il y a abandon financier des recherches dans le domaine (surtout aux USA), d'autant plus qu'on ne disposait pas à l'époque d'ordinateurs suffisamment puissants pour effectuer des calculs complexes [1, 7, 8]. Durant les années 1967- 1982, les recherches se poursuivent, mais déguisées, sous le couvert de divers domaines comme : le traitement adaptatif du signal, la reconnaissance de formes, la modélisation en neurobiologie, etc [7, 8].

J.J.Hopfield est un physicien reconnu à qui l'on doit le renouveau d'intérêt pour les réseaux de neurones en 1982. Il fixe préalablement le comportement à atteindre pour son modèle et construit à partir de là, la structure et la loi d'apprentissage correspondant au résultat espéré. Ce modèle est aujourd'hui encore très utilisé pour des problèmes d'optimisation [1, 7].

La Machine de Boltzmann est le premier modèle connu apte à traiter de manière satisfaisante les limitations recensées dans le cas du perceptron à 1983. Mais l'utilisation pratique s'avère difficile, la convergence de l'algorithme étant extrêmement longue (les temps de calcul sont considérables).

La rétropropagation de gradient apparaît à 1985. C'est un algorithme d'apprentissage adapté aux réseaux de neurones multicouches (aussi appelés Perceptrons multicouches). Dès cette découverte, nous avons la possibilité de réaliser une fonction non linéaire d'entrée/sortie sur un réseau en décomposant cette fonction en une suite d'étapes linéairement séparables.

3. Le neurone

3.1. Neurone biologique

Le neurone considéré comme l'unité de base du système nerveux central est constitué d'un corps cellulaire appelé *soma*, qui se ramifie pour former ce que l'on nomme les *dendrites*.

Les dendrites acheminent l'information de l'extérieur, ou d'autres neurones, vers le soma. Après traitement de l'information par le corps cellulaire, l'information est transmise aux autres neurones à travers un prolongement de sortie appelé *axone*.

Entre un axone et une dendrite, il existe un espace vide appelé *synapse*, à travers lequel la transmission se fait par l'intermédiaire de substances chimiques.

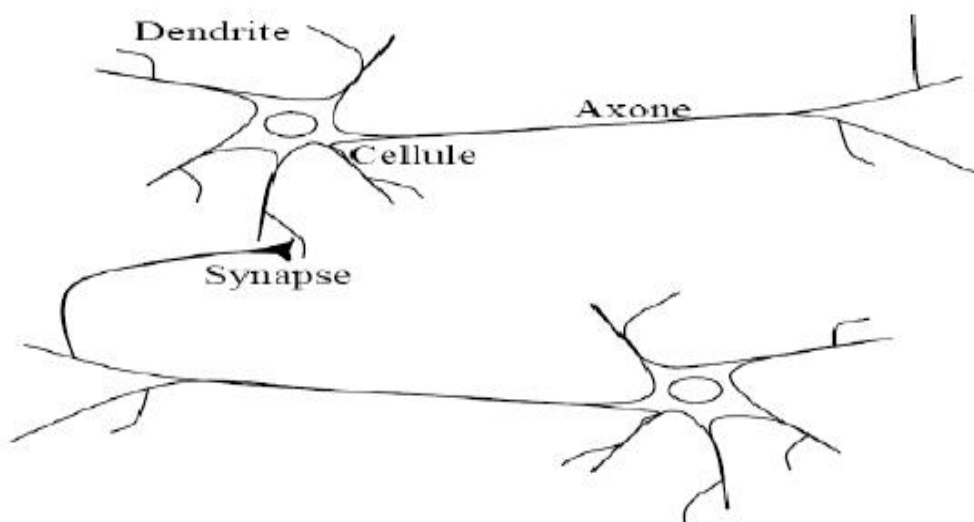


Figure III-1 : Représentation d'un neurone biologique.

Le cerveau se compose d'environ 10^{12} (mille milliards), de cellules nerveuses appelées neurones [10]. La sortie de chaque neurone est liée à des milliers d'autres neurones. Chaque neurone effectue un traitement local. Il collecte les signaux issus des dendrites et leur fait la somme. Si l'amplitude résultante dépasse un certain seuil interne, un signal est envoyé à travers l'axone vers d'autres neurones.

3.2. Neurone artificiel (formel)

Le neurone artificiel est un modèle de calcul dont la conception est inspirée du fonctionnement de vrais neurones. Ce neurone formel peut être considéré comme un opérateur recevant un nombre variable d'entrées du milieu extérieur ou d'autres neurones, chacune de ces entrées est pondérée par un poids dit poids synaptique, et fournissant une sortie seulement quand la somme des entrées pondérées dépasse un certain seuil interne. L'évaluation de la sortie se fait typiquement par la somme pondérée des entrées, et le passage du résultat à travers une non linéarité.

Mathématiquement, ceci peut être modélisé par les équations suivantes :

$$S = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i + \theta_0 \quad (\text{III.1})$$

$$y = f(s) \quad (\text{III.2})$$

x_i : Composantes du vecteur d'entrée.

w_i : Composantes du vecteur poids synaptique.

$\theta_0 = w_0 \cdot x_0$; où $x_0=1$.

S : Somme pondérée appelée potentiel.

Le terme θ_0 est une constante scalaire appelé Biais. Il représente la valeur du seuil interne qui doit être dépassée pour l'activation de la sortie du neurone. La non linéarité $f(\cdot)$ est appelée *fonction d'activation*.

La somme pondérée peut se réécrire sous la forme simple suivante:

$$S = \sum_{i=0}^n w_i \cdot x_i \quad (\text{III.3})$$

Conceptuellement le fonctionnement du neurone peut être représenté par le modèle de la figure (III-2).

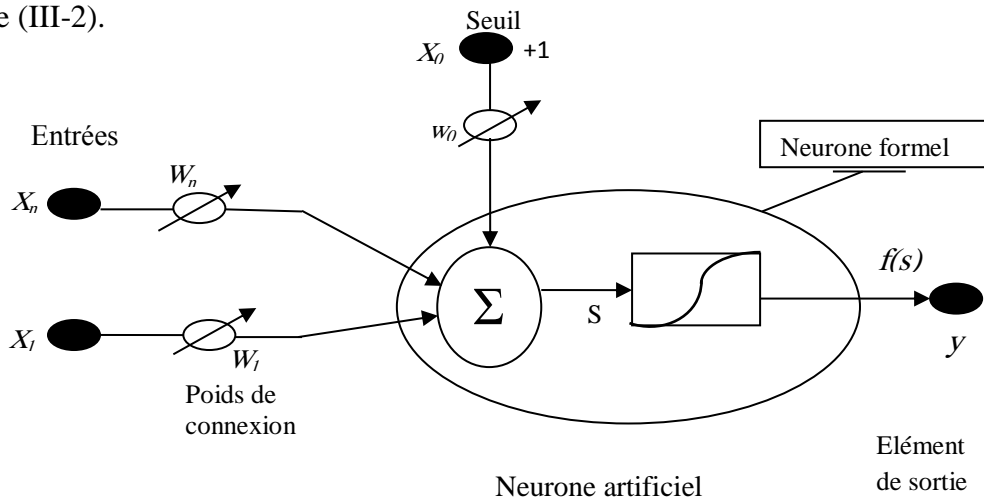


Figure III-2 : Modèle d'un neurone formel à n entrées [11].

3.3. Principe du neurone artificiel

Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones en amont ou des capteurs composant la machine dont il fait partie. A chacune de ses entrées est associé un poids représentatif de la force de la connexion.

Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones en aval. A chaque connexion est associé un poids.

Un nœud reçoit des valeurs en entrée et renvoie n valeurs en sortie. Toutes ces valeurs sont normalisées pour être comprises entre 0 et 1 et, parfois, entre -1 et 1, selon les bornes de la fonction de transfert. Une fonction de combinaison calcule une première valeur à partir des nœuds connectés en entrée et poids des connexions. Dans les réseaux les plus courants, les perceptrons, il s'agit de la somme pondérée $\sum n_i p_i$ des valeurs des nœuds en entrée.

Afin de déterminer une valeur en sortie, une fonction d'activation est appliquée à cette valeur. Les nœuds de la couche d'entrée sont triviaux dans la mesure où ils ne combinent rien, et ne font que transmettre la valeur de la variable qui leur correspond. Un nœud de perceptrons se présente sur la (figure III-3) Dans ce schéma, n_i est la valeur du nœud i du niveau précédent. La sommation sur i correspond à l'ensemble des nœuds du niveau précédent connectés au nœud observé et p_i , le poids associé à la connexion entre i et le nœud observé. Dans ce schéma, on note aussi que f est la fonction de transfert associée au nœud observé.

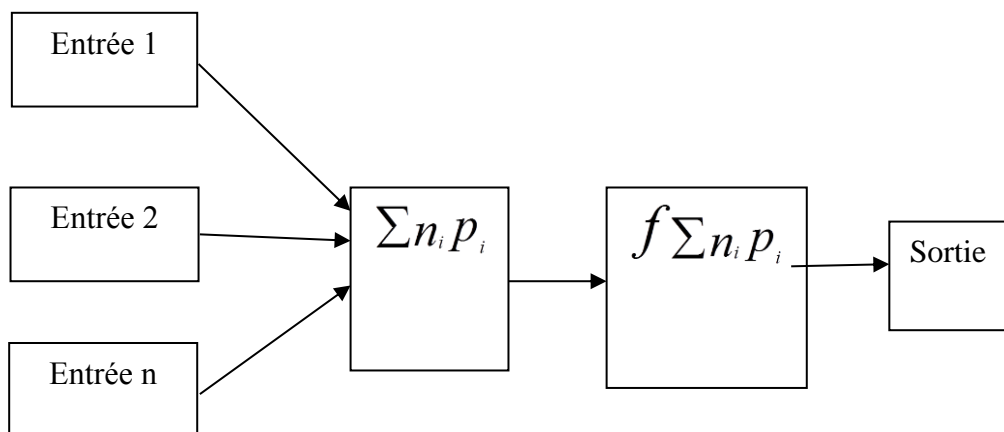


Figure III-3 : Nœud d'un réseau de neurone

La première version d'un nœud de réseau de neurones est celle de Mc Culloch et W. Pitts et date de 1943. S'inspirant de leurs travaux sur les neurones biologiques, ils ont proposé le modèle du neurone formel qui se voit comme un opérateur effectuant une somme pondérée de ses entrées suivie d'une fonction d'activation (ou de transfert) [12].

3.4. Fonctions d'activation du neurone artificiel

Plusieurs types de fonctions d'activations sont utilisés, servant à limiter l'amplitude du signal de sortie du neurone et reproduire l'effet de seuil observé sur les neurones biologiques.

Le tableau (III-1) énumère ces différentes fonctions. Cependant, certaines fonctions sont les plus utilisées, telles que: la fonction à seuil, la fonction linéaire, et la fonction sigmoïdale.

3.4.1. Fonction tout/ rien (à seuil) :

La fonction seuil applique un seuil sur son entrée. Elle retourne 0 pour une entrée négative et 1 pour une entrée positive ou nulle. Elle est définie comme suit:

$$f(x)=\begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

3.4.2. Fonction linéaire :

La fonction linéaire est très simple, elle affecte directement son entrée à sa sortie.

$$f(x)=x \quad (\text{III.5})$$

3.4.3. Fonction sigmoïde :

Plus connue et plus populaire. Elle est souvent utilisée dans les réseaux de neurones. L'un de ses avantages est sa dérivabilité. Cette propriété est très importante, du fait qu'elle a permis de développer des algorithmes d'apprentissage à base du gradient pour les réseaux multicouches.

Deux formes de sigmoïdes sont utilisées :

- Sigmoïde (logistique) : Ayant deux niveaux de saturation (0 et 1) est définie comme suite :

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (\text{III.6})$$

- Tangente hyperbolique : Peut être exprimée par la tangente-hyperbolique suivante :

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} \quad (\text{III.7})$$

Tableau III-1 : Fonctions de transfert $f(x)$.

Nom de la fonction	Relation entrée / sortie	L'allure
Seuil	$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$	
Seuil symétrique	$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$	
Linéaire	$f(x) = x$	
Linéaire saturée	$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ x & \text{si } 0 \leq x \leq 1 \\ 1 & \text{si } x > 1 \end{cases}$	
Linéaire saturée Symétrique	$f(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } x < -1 \\ x & \text{si } -1 \leq x \leq 1 \\ 1 & \text{si } x > 1 \end{cases}$	
Linéaire positive	$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ x & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$	
Sigmoïde	$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$	
Tangente hyperbolique	$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$	

4. Réseaux de neurones

Les réseaux de neurones artificiels sont des réseaux fortement connectés de processeurs (unités / neurones) élémentaires fonctionnant en parallèle. Chaque processeur élémentaire calcule une sortie unique sur la base des informations qu'il reçoit. Toute structure hiérarchique de réseaux est évidemment un réseau.

Les capacités d'un seul neurone sont limitées. L'implantation de fonctions complexes nécessite l'intégration de plusieurs neurones, fonctionnant en parallèles, sous forme d'un réseau à topologie spécifique. Les entrées d'un neurone sont soit les entrées du réseau global, soit les sorties d'autres neurones. Les connexions entre les neurones qui composent le réseau décrivent la topologie du modèle. Elle peut être quelconque, mais le

plus souvent il est possible de distinguer une certaine régularité.

Les paramètres les plus importants de ce modèle sont les coefficients synaptiques. Ce sont eux qui construisent le modèle de résolution en fonction des informations données au réseau.

Il faut donc trouver un mécanisme qui permet de les calculer à partir des grandeurs que l'on peut acquérir du problème. C'est le principe fondamental de l'apprentissage [13].

Une fois que l'ajustement des poids synaptiques a été effectué, le réseau de neurones constitue un modèle statistique non linéaire [14]. L'avantage des réseaux de neurones sur les méthodes de régression classique est qu'ils nécessitent, en général, un nombre de paramètres ajustables plus faible pour obtenir un modèle non linéaire de précision donnée [15].

4.1. Les étapes d'un réseau de neurones pour la prédiction

De façon générale, les étapes dans la mise en œuvre d'un réseau de neurones pour la prédiction ou le classement sont :

1. l'identification des données en entrée et en sortie,
2. la normalisation de ces données,
3. la constitution d'un réseau avec une structure adaptée,
4. l'apprentissage du réseau,
5. le test du réseau,
6. l'application du modèle généré par l'apprentissage,
7. la dénormalisation des données en sortie.

4.2. Les avantages des réseaux de neurones

Les réseaux traitent facilement les données réelles normalisées et les algorithmes sont robustes au bruit. Ce sont, par conséquent, des outils bien adaptés pour le traitement de données complexes éventuellement bruitées comme la reconnaissance de formes et le calcul d'une sortie à partir d'un vecteur d'entrée. Par contre, l'échantillon nécessaire à l'apprentissage doit être suffisamment grand et représentatif des sorties. En effet, il faut passer un grand nombre de fois tout l'échantillon pour l'apprentissage ce qui rend ce dernier long. Sachant que l'apprentissage n'est pas incrémental et, si les données évoluent avec le temps, il est nécessaire de relancer une phase d'apprentissage pour s'adapter à cette évolution [16].

5. Architecture des réseaux de neurones

On distingue deux structures de réseau, en fonction du graphe de leurs connexions, c'est-à-dire du graphe dont les nœuds sont les neurones et les arêtes les «connexions» entre ceux-ci :

- Les réseaux de neurones statiques (ou acycliques, ou non bouclés) : sont utilisés généralement pour la reconnaissance, la classification ou la prédiction [17].
- Les réseaux de neurones dynamiques (ou récurrents, ou bouclés) : sont le plus souvent utilisés généralement pour des tâches telles que le traitement du signal, la commande ou la régulation [12, 17].

5.1. Réseaux de neurones non bouclés

Dans ce type de structure dite 'feedforward', la propagation de l'information se fait uniquement de l'entrée vers la sortie. Les neurones de la même couche peuvent se connecter uniquement avec les neurones de la couche suivante. L'architecture la plus utilisée est le perceptron multicouche. Les neurones composant ce réseau s'organisent en N couches successives ($N \geq 3$).

L'information dans ces réseaux se propage des entrées vers les sorties, sans aucune rétroaction. Chaque neurone dans une couche est relié par des connexions avec tous les neurones de la couche suivante et de la couche précédente sans qu'il n'y ait de connexions entre neurone d'une même couche. Les sorties y_k sont exprimées en fonction de ses entrées x_n comme étant $y_k = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. La figure (III-4) illustre la structure de ce type de réseau.

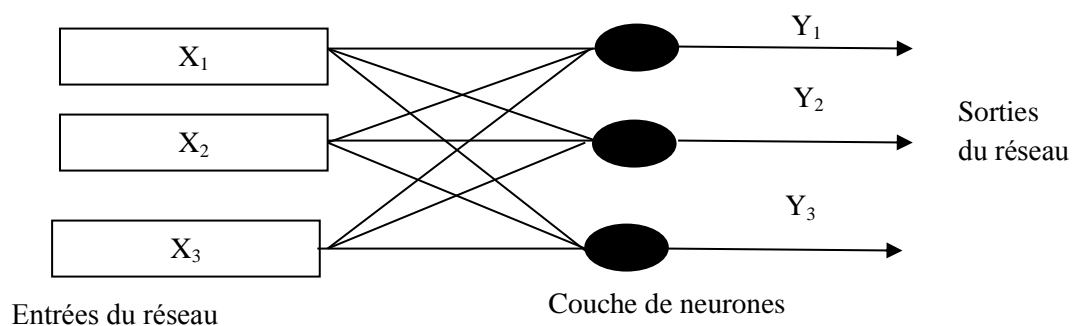


Figure III-4 : Structure d'un réseau non récurrent [11].

Il existe deux types de réseaux de neurones : les réseaux complètement connectés et les réseaux à couche. Le réseau perceptron multicouche est un cas particulier de ce dernier type.

5.1.1. Réseaux de neurones complètement connectés : Dans un réseau complètement connecté, les entrées puis les neurones (cachés et de sortie) sont numérotés et pour chaque neurone ses entrées sont toutes les entrées du réseau ainsi que les sorties des neurones de numéro inférieur et sa sortie est connectée aux entrées de tous les neurones de numéro supérieur.

5.1.2. Réseaux de neurones à couches : Dans une architecture de réseaux à couches, les neurones cachés sont organisés en couches, les neurones d'une même couche n'étant pas connectés entre eux. De plus les connexions entre deux couches de neurones non consécutives sont éliminées. Une telle architecture est historiquement très utilisée, surtout en raison de sa pertinence en classification.

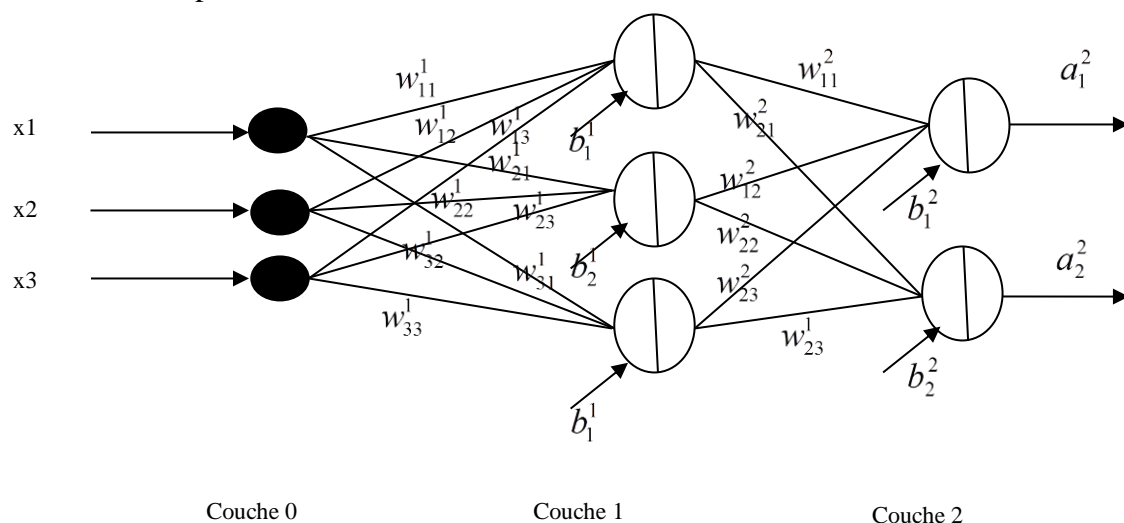


Figure III-5 : Perceptron à une couche cachée.

Dans l'exemple suivant (figure III-5), nous présentons un perceptron à trois couches. Les neurones de la première couche, nommée couche d'entrée, envoient leur activation forcée à la valeur d'entrée. La dernière couche est appelée couche de sortie. Elle regroupe les neurones dont les fonctions d'activation sont généralement de type linéaire. Les couches intermédiaires sont appelées couches cachées. Elles constituent le cœur du réseau. Sur la figure IV.5, les termes b_{il} et w_{ijl} désignent respectivement le biais du neurone i de la couche l et le poids de connexion entre le neurone j de la couche $l-1$ et le neurone i de la couche l . Tenant compte de ces notations, la sortie du neurone i dans la couche l est peut être donnée par :

$$a_i^l = \sum_j^{N_{l-1}} w_{ij}^l \times u_j^{l-1} + b_i^l \quad (\text{III.8})$$

$$u_i^l = f^l(a_i^l) \quad (\text{III.9})$$

f est la fonction d'activation des neurones de la couche l. On peut réécrire les équations ci-dessus sous forme matricielle comme suit :

$$a^l = W^l \times u^{l-1} + b^l \quad (\text{III.10})$$

$$u^l = f^l(a^l) \quad (\text{III.11})$$

Avec $a^l = (a_1^l, a_2^l, \dots, a_{N_l}^l)^T$, $u^l = (u_1^l, u_2^l, \dots, u_{N_l}^l)^T$, $b^l = (b_1^l, b_2^l, \dots, b_{N_l}^l)^T$ et

$$W^l = \begin{pmatrix} w_{11}^l & w_{12}^l & \dots & w_{1N_{l-1}}^l \\ w_{21}^l & w_{22}^l & \dots & w_{2N_{l-1}}^l \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ w_{N_l1}^l & w_{N_l2}^l & \dots & w_{N_lN_{l-1}}^l \end{pmatrix} \quad (\text{III.12})$$

Le perceptron multicouche présente une alternative prometteuse pour la modélisation des systèmes complexes. Avec une seule couche cachée, il constitue un approximateur universel [18, 19].

5.2. Réseaux de neurones bouclés

Un réseau dynamique ou récurrent possède la même structure qu'un réseau multicouche muni de rétroactions. Les connexions rétroactives peuvent exister entre tous les neurones du réseau sans distinction, ou seulement entre certains neurones (les neurones de la couche de sortie et les neurones de la couche d'entrée ou les neurones de la même couche par exemple). La figure III-6 montre deux exemples de réseaux récurrents. Le premier est un simple multicouche qui utilise un vecteur d'entrée qui contient les copies des activations de la couche de sortie du réseau et le deuxième est un réseau à mémoire se distingue du premier par la présence des unités mémoires [20].

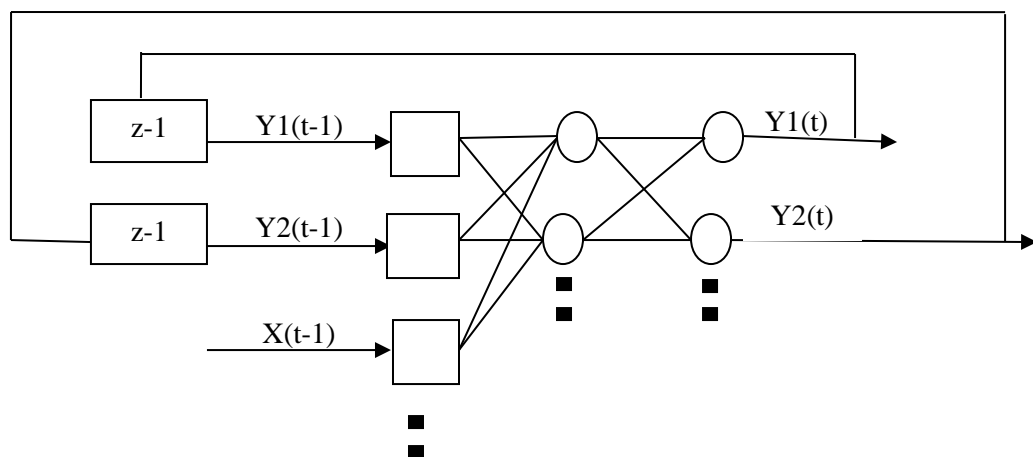


Figure III-6 : Réseau de neurone bouclé

6. L'apprentissage

L'apprentissage d'un réseau de neurones peut être défini comme la phase durant laquelle les divers paramètres le caractérisant sont remis à jour jusqu'à ce qu'ils permettent au réseau d'approximer au mieux la fonction qu'il a à réaliser. Selon l'application dans laquelle le réseau va être intégré, la fonction à approcher peut être connue ou inconnue analytiquement. En effet, le phénomène physique, chimique, économique, biologique, etc. qui nécessite l'emploi d'un réseau de neurones peut être parfaitement modélisé par l'intermédiaire d'équations analytiques ou simplement observables, mettant en jeu un nombre fini de valeurs expérimentales de sorties fonction de valeurs d'entrées bien choisies, sans que les relations qui les relient ne soient connues [21].

Dans la majorité des algorithmes actuels, les variables modifiées pendant l'apprentissage sont les poids des connexions. L'apprentissage est la modification des poids du réseau dans l'optique d'accorder la réponse du réseau aux exemples et à l'expérience. Les poids sont initialisés avec des valeurs aléatoires. Puis des exemples expérimentaux représentatifs du fonctionnement du procédé dans un domaine donné, sont présentés au réseau de neurones.

Ces exemples sont constitués de couples expérimentaux de vecteurs d'entrée et de sortie. Une méthode d'optimisation modifie les poids au fur et à mesure des itérations pendant lesquelles on présente la totalité des exemples, afin de minimiser l'écart entre les sorties calculées et les sorties expérimentales. Afin d'éviter les problèmes de surapprentissage, la base d'exemples est divisée en deux parties : la base d'apprentissage et la base de test. L'optimisation des poids se fait sur la base d'apprentissage, mais les poids retenus sont ceux pour lesquels l'erreur obtenue sur la base de test est la plus faible. En effet, si les poids sont optimisés sur tous les exemples de l'apprentissage, on obtient une précision très satisfaisante sur ces exemples mais on risque de ne pas pouvoir généraliser le modèle à des données nouvelles. A partir d'un certain nombre d'itérations, le réseau ne cherche plus l'allure générale de la relation entre les entrées et les sorties du système, mais s'approche trop près des points et « apprend » le bruit [21].

Surapprentissage : Il arrive qu'à faire apprendre un réseau de neurones toujours sur le même échantillon, celui-ci devient inapte à reconnaître autre chose que les éléments présents dans l'échantillon. Le réseau ne cherche plus l'allure générale de la relation entre les entrées et les sorties du système, mais cherche à reproduire les allures de l'échantillon. On parle alors de

surapprentissage : le réseau est devenu trop spécialisé et ne généralise plus correctement.

6.1. Type d'Apprentissage des réseaux de neurones

La propriété la plus importante pour un réseau de neurones, est sûrement sa capacité d'apprendre de son environnement, d'améliorer sa performance à travers un processus d'apprentissage. L'apprentissage est une phase du développement d'un réseau de neurones durant laquelle les valeurs des poids synaptiques du réseau sont ajustées pour remplir au mieux la tâche à laquelle le réseau est destiné.

On peut distinguer trois types d'apprentissage

- L'apprentissage supervisé.
- L'apprentissage non supervisé.
- L'apprentissage par renforcement.

6.1.1. Apprentissage supervisé

Dans l'apprentissage supervisé, des couples de données (entrée, sortie attendue correspondante) sont fournis au réseau; les différentes réponses possibles du réseau étant donc connues a priori. Les paramètres du réseau sont ajustés de façon à minimiser le signal d'erreur constitué par la différence entre la sortie obtenue et la valeur désirée correspondante. Un apprentissage est dit supervisé lorsqu'on force le réseau à converger vers un état final précis, en même temps qu'on lui présente un motif. L'apprentissage supervisé est illustré d'une manière conceptuelle par la figure (III-7).

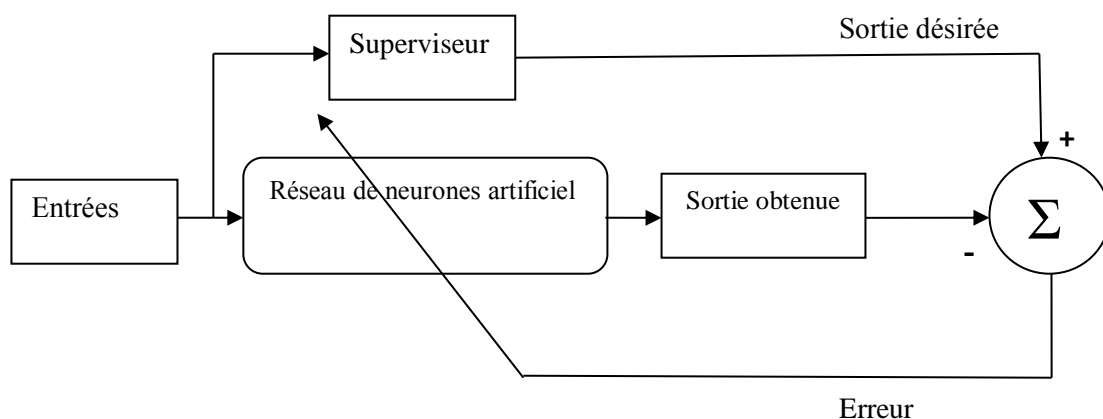


Figure III-7 : Schéma bloc de l'apprentissage supervisé d'un réseau de neurone.

6.1.2. Apprentissage non supervisé

Dans un modèle non supervisé, on n'a pas de connaissance a priori sur l'information que l'on voudrait extraire. Le réseau est laissé libre de converger vers n'importe quel état final.

Dans ce cas, les exemples présentés à l'entrée provoquent une auto-adaptation du réseau (Figure (III-8)) afin de produire des valeurs de sortie qui soient proches en réponse à des valeurs d'entrées similaires [22].

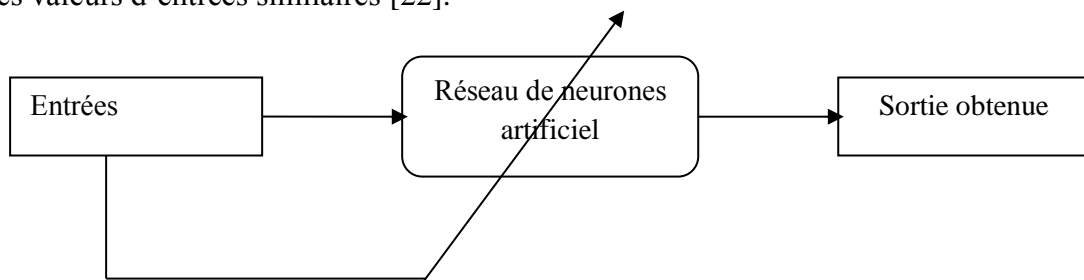


Figure III-8 : Schéma bloc de l'apprentissage non supervisé d'un réseau de neurone.

6.1.3. Apprentissage par renforcement

L'apprentissage par renforcement est utile quand une information de retour sur la qualité de la performance est fournie. Mais la conduite souhaitée du réseau n'est pas complètement spécifiée par le professeur [11].

7. Modèles des réseaux de neurones

7.1. Le modèle MLP (Multi Layer Perceptron)

7.1.1. Définition :

Le perceptron multicouche MLP (*Multi Layer Perceptron* en anglais) est le modèle du réseau de neurone est sans doute le plus simple et le plus connu des réseaux de neurones ; le plus utilisé pour des problèmes d'approximation, de classification et de prédiction [23, 24]. Il est constitué de plusieurs couches de neurones totalement connectées. La fonction d'activation utilisée principalement la fonction sigmoïde [25].

L'information dans le réseau se propage d'une couche à l'autre, on dit qu'ils sont de type «feed-forward». Nous distinguons trois types de couches :

-Couche d'entrée : les neurones de cette couche reçoivent les valeurs d'entrée du réseau et les transmettent aux neurones cachés. Chaque neurone reçoit une valeur, il ne fait pas donc de sommation.

-Couches cachées : chaque neurone de cette couche reçoit l'information de plusieurs couches précédentes, effectue la sommation pondérée par les poids, puis la transforme selon sa fonction d'activation qui est en général une fonction sigmoïde. Par la suite, il envoie cette réponse aux neurones de la couche suivante.

-Couche de sortie : elle joue le même rôle que les couches cachées, la seule différence entre ces deux types de couches est que la sortie des neurones de la couche de sortie n'est liée à aucun autre neurone [26].

7.1.2. Architecture du modèle :

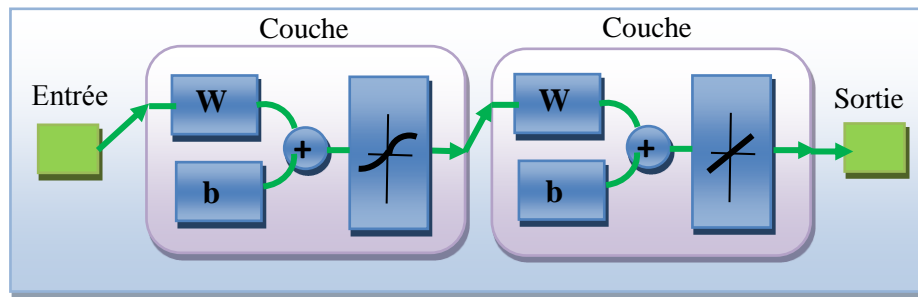


Figure III-9 : Architecture du modèle MLP.

7.1.3. Equation du modèle MLP :

Considérons le réseau de neurones MLP « Multi Layer Perceptron » à L couches, de p entrées et q sorties. La couche d'entrée contient les composantes du vecteur d'entrée (x_i)

Où : $0 \leq i \leq p$.

Les calculs se font couche par couche de l'entrée vers la sortie.

La sortie du $j^{\text{ème}}$ neurone de la couche l ($0 < l \leq L$) est donnée par:

$$S_j^l = \sum_{i=0}^{N^{l-1}} w_{ji}^l \cdot u_i^{l-1} \quad (\text{III.13})$$

$$u_j^l = f(S_j^l) \quad (\text{III.14})$$

Où S_j^l : est la somme pondérée à l'entrée du $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).

N_l : est le nombre de neurones de la couche (l).

U_{jl} : est la sortie du $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).

W_{jli} : est le poids qui relie le $i^{\text{ème}}$ neurone de la couche ($l-1$) au $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche (l).

L : nombre de couches dans le réseau. La couche 0 correspond aux nœuds d'entrée.

$f(\cdot)$: est la fonction d'activation, elle peut être linéaire ou non pour les neurones de la couche de sortie, mais toujours non linéaire pour les neurones appartenant à une couche cachée.

On note que le premier élément de chaque vecteur u_l ($l=0, 1, \dots, L-1$) est mis à un (i.e., $u_{0l}=1$) et que le produit ($w_{j0l} * u_{0l-1}$) représente la valeur du seuil interne du $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche l [27].

7.1.4. Avantages et inconvénients des réseaux MLP

Parmi les points fort de ce type de réseaux il y'a :

- Capacité de représenter n'importe quelle fonction, linéaire ou pas, simple ou complexe.
- Faculté d'apprentissage à partir d'exemples représentatifs, par « rétro propagation des Erreurs ». L'apprentissage (ou construction du modèle) est automatique
- Résistance au bruit ou au manque de fiabilité des données.
- Simple à manier, beaucoup moins de travail personnel à fournir que dans l'analyse statistique classique. Aucune compétence en mathématiques, informatique statistique requise.
- Comportement moins mauvais en cas de faible quantité de données.
- Pour l'utilisateur novice, l'idée d'apprentissage est plus simple à comprendre que les complexités des statistiques multi variables [28].

Les réseaux MLP présentent aussi certains inconvénients à savoir :

- L'absence de méthode systématique permettant de définir la meilleure topologie du réseau et le nombre de neurones à placer dans la (ou les) couche(s) cachée(s).
- Le choix des valeurs initiales des poids du réseau et le réglage du pas d'apprentissage, qui jouent un rôle important dans la vitesse de convergence.
- Le problème du sur apprentissage (apprentissage au détriment de la généralisation).
- La connaissance acquise par un réseau de neurone est codée par les valeurs des poids sont inintelligibles pour l'utilisateur [28].

7.2. Le modèle NARX (Non Linéaire AutoRégressif eXogène)

7.2.1. Définition :

Le réseau de neurone autorégressif non linéaire à entrées exogènes (NARX) est un réseau dynamique récurrent, avec des connexions de rétroaction entourant plusieurs couches du réseau [29].

Le modèle NARX est basé sur le modèle linéaire autorégressif de réseaux neuronaux à entrées exogènes (ARX), qui constituent un outil standard dans l'identification de modèles linéaires à boîte noire. Ce modèle peut représenter une grande variété de comportements dynamiques non linéaires et ont été largement utilisés dans diverses applications. [30, 31] Il est utilisé généralement dans la modélisation des séries de temps.

7.2.2. Architecture du modèle :

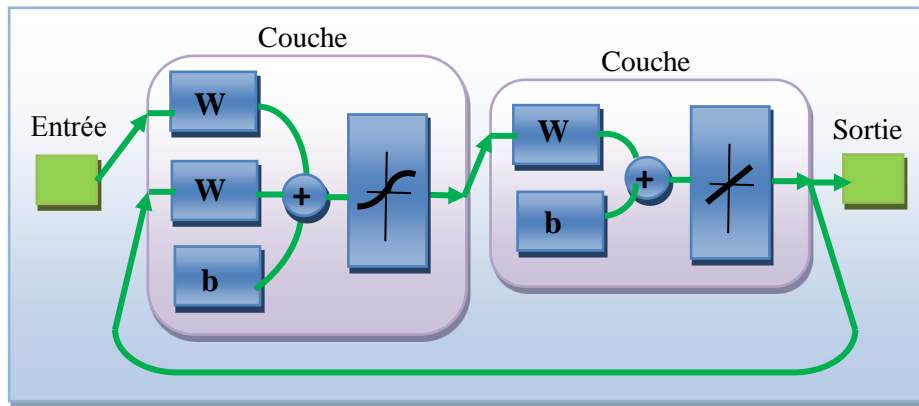


Figure III-10 : Architecture du modèle NARX.

7.2.3. Equation du modèle NARX :

Un modèle NARX est formulé comme une équation réursive entrée-sortie à temps discret. La sortie du réseau NARX pendant l'apprentissage peut être exprimé mathématiquement par Eq. (1) [32, 33].

$$y(t) = f(y(t-1), \dots, y(t-d_y), u(t-1), \dots, u(t-d_u)) + \zeta(t) \quad (\text{III.15})$$

Où $u(\cdot)$, $y(\cdot)$ sont l'entrée et la sortie du modèle, d_u , d_y sont des retards d'entrée et des retards de sortie, et $\zeta(\cdot)$ est un terme de bruit, généralement supposé gaussien et blanc. La forme prédictive optimale de ce modèle est

$$\hat{y}(t) = f(y(t-1), \dots, y(t-d_y), u(t-1), \dots, u(t-d_u)) \quad (\text{III.16})$$

Où $\hat{y}(t)$ dénote la prédiction en une seule étape de $y(t)$. Selon la façon dont la fonction $f(\cdot)$ est représentée et paramétrée, différentes structures de modèle NARX et, par conséquent, des algorithmes d'identification sont dérivés. Dans la suite, les expansions polynomiales et les réseaux de neurones seront utilisés à cette fin [32, 34].

7.2.4. Avantages et inconvénients des réseaux NARX :

Le principal avantage, du réseau NARX à série-parallèle, est à une architecture purement de propagation vers l'avant, et la rétro-propagation statique est utilisé pour l'apprentissage. Une fois, que le processus d'apprentissage (boucle ouverte) est terminé avec succès, la boucle de retour est fermée [35].

On peut distinguer aussi dans ce modèle les mêmes inconvénients du modèle précédent (MLP).

7.3. Le modèle RBF (Radial Basis Function)

7.3.1. Définition :

Un réseau de neurone de type RBF est un réseau à trois couches, avec une seule couche cachée [36]. Le nombre de neurones dans la couche cachée est égal au nombre d'observations historiques des prédicteurs (successeurs). En fait, chaque neurone dans la couche cachée représente une paire d'observations historiques de prédicteurs / dépendants. La sortie de chaque neurone est la contribution de l'observation historique dans l'estimation de l'événement en temps réel [29].

7.3.2. Architecture du modèle :

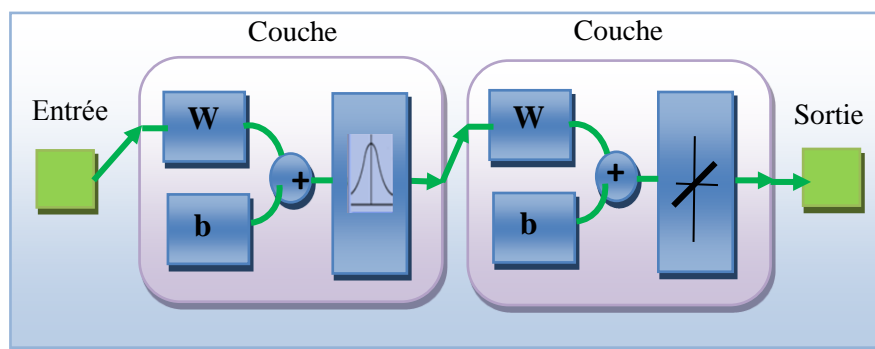


Figure III-11 : Architecture du modèle RBF.

7.3.3. Equation du modèle RBF :

Ce type de réseau utilise une fonction d'activation gaussienne. L'entrée de cette fonction est la distance euclidienne entre chaque entrée du neurone et le vecteur spécifié de même taille de l'entrée [37, 38]. La fonction gaussienne utilise la relation suivante:

$$f(X_r, b) = e^{-I^2} \quad (\text{III.17})$$

$$I = \|X_r - X_b\| * 0.8326 / h \quad (\text{III.18})$$

Où x_r : entrée réseau avec sortie inconnue. x_b : entrées observées dans le temps ou l'emplacement b , et h - propagation. La sortie de la fonction se rapproche de 0 à 1, quand $\|x_r - x_b\|$ elle approche une valeur élevée à 0, respectivement. La valeur de la sortie entre ces limites dépend de h , qui est également connu comme propagation. La forme générale de calcul d'une variable dépendante (Y_r) par prédicteur x_r est alors

$$Y_r = LW * f(X_r, X_b) + Biais \quad (\text{III.19})$$

Où LW : poids de la matrice des connexions de la couche cachée à la couche de sortie et $Biais$: la matrice de polarisation de la couche de sortie. Lorsqu'un réseau RBF est développé, les matrices LW et $Biais$ sont calculées en résolvant le système d'équation de

$$T_b = LW * f(X_r, X_b) + Biais \quad (\text{III.20})$$

Où T_b est la cible associée à b^{th} observation [39].

7.3.4. Avantages et des réseaux RBF:

Les réseaux de fonctions à base radiale ont de nombreuses utilisations, notamment l'approximation de fonction, la prédiction de séries temporelles, la classification et le contrôle de système.

Le RBF utilise des distances euclidiennes (entre les entrées et les poids, qui peuvent être considérés comme des centres) et, en général des fonctions d'activation gaussiennes qui peuvent être multivariées, ce qui rend les neurones plus sensibles localement.

Les neurones RBF ont une activation maximale lorsque les centres / poids sont égaux aux entrées. En raison de cette propriété, les réseaux de neurones RBF sont efficaces pour la détection des variations (si chaque neurone est centré sur un exemple d'apprentissage, les entrées éloignées de tous les neurones constituent de nouveaux modèles).

En outre, les RBF peuvent utiliser la rétropropagation pour l'apprentissage, ou des approches hybrides avec un apprentissage non supervisé dans la couche cachée (ils ont généralement une seule couche cachée). Enfin, les réseaux RBF facilitent la croissance de nouveaux neurones pendant l'apprentissage [40].

Les réseaux de fonctions radiales (RBFN) sont de plus en plus exploités en ingénierie en raison de leurs avantages par rapport aux perceptrons multicouches traditionnels, à savoir une convergence plus rapide, des erreurs d'extrapolation plus petites et une fiabilité plus élevée.

8. Exploitation des réseaux de neurone dans le suivi de la pollution atmosphérique

Les méthodes basées sur les RNA sont largement utilisées dans la surveillance de la qualité de l'air. Plusieurs auteurs ont appliqué les réseaux neuronaux artificiels (RNA) afin de prédire la concentration de polluants.

Les réseaux neuronaux artificiels et, en particulier, le perceptron multicouche (MLP) se sont avérés être des outils utiles et assez précis pour la prévision de la qualité de l'air, car ils peuvent tenir compte des relations non linéaires complexes entre les émissions, la qualité de l'air et les paramètres météorologiques et d'autres facteurs [1-3].

Comrie (1997) a comparé les modèles de réseau neuronal et de régression linéaire pour la prévision de l'ozone. Les statistiques de comparaison de modèles indiquent que les techniques de réseau neurone sont un peu meilleures que les modèles de régression quotidiens la prévision de l'ozone, et que tous les types de modèles sont sensibles à différents régimes météorologiques-ozone et le rôle de persistance à aider les prédictions [41].

Perez et al. (2000) ont comparé les prédictions produites par trois méthodes différentes: les réseaux de neurones multicouches, la régression linéaire et la persistance. Globalement, le réseau de neurones donnait les meilleurs résultats [42].

Kolehmainen et al. (2001) ont comparé deux méthodes basées sur les réseaux de neurones que sont les cartes auto-organisées (SOM) et la méthode Perceptrons multicouches (MLP). Les méthodes ont été évaluées à l'aide de séries chronologiques horaires de NO_2 et de données météorologiques de base. Les valeurs estimées pour la prévision ont été calculées en trois façons: en utilisant les composants périodiques seuls, en appliquant des méthodes de réseau de neurone aux valeurs résiduelles après avoir enlevé les composants périodiques, et en appliquant uniquement des réseaux de neurones aux données d'origine. Les résultats ont montré que les meilleures prévisions Des estimations peuvent être obtenues en appliquant directement un réseau MLP aux données d'origine, et donc, une combinaison des méthodes de régression périodique et algorithmes neuronaux ne donne aucun avantage sur une application directe de neurones algorithmes [43].

Viotti et al. (2002) ont appliqué les réseaux neuronaux pour prédire plusieurs polluants : l'ozone, le dioxyde d'azote, le monoxyde de carbone, le benzène et les particules, en

utilisant une forme spéciale de la fonction logistique d'activation avec trois paramètres ajustables et l'algorithme d'apprentissage basé sur la rétro-propagation. Leurs résultats ne sont pas faciles à interpréter, car les indices de performance calculés ne font pas partie de la liste des indices classiques [44].

Balaguer Ballester et al. (2002) ont présenté une comparaison entre plusieurs modèles appliqués pour prédire, 24 heures en avance, les concentrations d'ozone : des modèles paramétriques auto-régressifs à moyenne mobile avec entrées exogènes (ARMAX), un modèle à réponse impulsionnelle finie (RIF) et un modèle basé sur le MLP. Ils ont exploité des données météorologiques comme : la vitesse du vent, sa direction et la température. Les cinq critères de performance calculés donnaient de bons résultats et montraient que le MLP était le modèle plus performant [45].

Kukkonen et al. (2003) effectuent une comparaison entre cinq modèles neuronaux, un modèle linéaire statistique et un autre déterministe, pour prédire les concentrations de dioxyde d'azote et de particules enregistrées par deux stations situées au centre d'Helsinki. Les résultats obtenus étaient en faveur des modèles non-linéaires (basés sur les ANN) plus performants que celui déterministe ou celui linéaire statistique [46].

Schlink et al. (2003) ont testé quinze modèles statistiques pour prédire l'ozone en exploitant dix ensembles de données représentant des émissions et des données météorologiques partout en Europe. La comparaison a été faite aussi avec un modèle déterministe. Les résultats obtenus ont montré un succès assez limité pour les techniques linéaires, mais une meilleure performance pour les réseaux neuronaux et les modèles additifs généralisés qui peuvent gérer mieux les non-linéarités statiques des séries temporelles [47].

Liu et al. (2004) ont construit un modèle de prédiction d'émission pour un moteur diesel à gaz naturel comprimé (GNC) basé sur un réseau neuronal RBF pour analyser l'effet des principaux paramètres de performance sur les émissions de CO, NO_x de DFE. Les résultats de la prédiction concordent bien avec les mesures même s'il y'avait quelques limitations, en raison de la dépendance à la quantité des données de l'échantillon expérimental [48].

Elshafei et al., (2006) ont étudié les émissions de NO_x d'une chaudière en proposant un capteur soft exploitant les réseaux de neurones à fonctions polynomiales (PolyNets), en

utilisant un modèle de combustion de la chaudière industrielle considérée. La performance du capteur soft PolyNet proposé est évaluée détail dans et comparé avec les performances du MLP. Il est démontré que PolyNets réalise mieux précision avec des structures plus simples, et pourrait être apprentissage plus rapidement que le MLP NN par un factor de 6-8 fois. [49].

Agirre-Basurko et al. (2006) ont étudié une prédiction en temps réel de l'ozone et du dioxyde d'azote sur un horizon de 8 heures en utilisant des données de trafic et météorologiques et ce en considérant deux modèles basés sur le MLP et un modèle basé sur la régression linéaire multiple. La comparaison a été basée sur des critères utilisant entre autres le coefficient de corrélation et l'erreur quadratique moyenne normalisée. Les résultats étaient favorables au MLP, le modèle le plus performant et le plus précis [50].

Sousa et al. (2007) ont appliqué les réseaux de neurones pour prédire l'ozone en utilisant l'analyse en composants principales (ACP) pour réduire le nombre des entrées du modèle ainsi que leur redondance. Les résultats obtenus en utilisant les données originales sont comparés avec ceux obtenus en utilisant l'ACP [51].

Brunelli et al. (2007) ont exploité le réseau de neurone récurrent de type Elman pour prédire deux jours à l'avance la concentration diurne maximale des polluants suivants : SO₂, NO₂, O₃, CO, PM₁₀ à Palerme (Italie) en utilisant comme prédicteurs météorologiques la vitesse du vent et sa direction, la pression et la température. Le coefficient de corrélation obtenu variait entre 0,72 et 0,97 pour les divers polluants testés [52].

Kurt et al. (2008) ont développé un système de prévision de la pollution de l'air en ligne pour la région d'Istanbul. Le système prédit trois indicateurs de pollution de l'air (SO₂, PM₁₀ et CO) pour les trois jours suivants (+1, +2 et +3 jours) en utilisant des réseaux de neurones Feed Forward (FFNN) pour prévoir le futur avec trois polluants (SO₂, PM₁₀ et CO). Les résultats de meilleure prédiction sont obtenus dans la méthode cumulative. Deuxièmement, la taille de la base de données d'apprentissage utilisée dans le modèle est optimisée. La meilleure modélisation la performance avec un taux d'erreur minimum est atteinte en utilisant 3-15 jours passés dans l'ensemble de données d'entraînement. De meilleures prévisions avec une plus grande précision sont observées en utilisant le jour de la semaine comme paramètre d'entrée [53].

Ibarra et al., (2008) ont fait étudié la prédiction jusqu'à cinq jours avant pour cinq polluants (SO_2 , CO , NO_2 , NO et O_3) et six sites dans la région de Bilbao, en utilisant le modèle MLP, la fonction de base radiale (RBF) et le réseau de régression généralisée (GRNN). Leurs résultats montrent que dans certains cas, le GRNN et le RBF pouvaient mieux fonctionner que le MLP [54].

Coman et al. (2008) ont prédit des concentrations d'ozone pour un horizon de 24 heures à Paris. Ils ont proposé deux modèles: une structure utilisée par modèle dynamique qui implique une cascade de 24 MLP et avec 24 sorties, et un modèle statique avec un MLP classique avec 24 sorties. Le meilleur modèle de prédiction était le MLP dynamique [55].

Bo et al. (2010) ont proposé une méthode de prédiction de la teneur en gaz basée sur un réseau neurone GA-RBF optimisé par un algorithme génétique dans la structure et les paramètres du réseau. Les résultats de prévision ont montré que l'algorithme a bonne précision des prédictions et la vitesse de calcul rapide et est utile pour la prédiction et la prévention des catastrophes gazières [56].

Shourong et al. (2010) ont appliqué le réseau de neurones RBF avec des séries temporelles sur les émissions de CO_2 pour faire une prévision des émissions de CO_2 en Chine. Le résultat indique que le réseau de neurone RBF améliore la fiabilité globale de prévision de série temporelle et a une grande précision [57].

Chuanbao et Fuwu, (2011) ont décrit une approche permettant de remplacer le capteur de NO_x par un moteur par une perception de NO_x basée sur un réseau de neurones à fonction de base radiale (RBFNN). Les résultats montrent un bon accord entre les prédictions et les données mesurées dans l'état stable conditions étudiées. La méthodologie sera également évaluée pour utiliser en fonctionnement transitoire, et sur la durée de vie de l'application associée. [58].

Kyriaki et al. (2011) ont utilisé un système de réseau de neurones à base radiale, qui classe les pays en fonction de leurs émissions de carbone, de soufre et d'oxydes d'azote, et de leur revenu national brut. Les résultats ont montré que le lien entre la pollution de l'environnement et la croissance économique ont été maintenues pays de l'Est [59].

Cortina-Januchs et al. (2012) ont utilisé un réseau de neurone de type perceptron multicouche pour faire la prévision une heure à l'avance la concentration d'un polluant

(SO₂). L'exploitation du réseau a été combinée avec des algorithmes de classification de la logique floue (Fuzzy K-Means et Fuzzy c-Means) afin d'améliorer la prédiction et d'identifier la relation entre les performance de la prédiction des concentrations de polluants et les variables météorologiques. Les résultats ont montré que les informations obtenues dans l'étape de classification permettent une prédiction exploitant des données d'un passé de 2 heures [60].

Zheng et Shang (2013), dans le but de prédire la concentration en PM_{2.5}, ont exploités les variables PM₁₀, SO₂, NO₂, température, pression, humidité, direction du vent et vitesse du vent comme facteurs d'influence. Le modèle de prédiction a été basé sur le réseau de neurone RBF pour prédire la concentration de PM_{2.5}. Les résultats ont montré que le modèle de réseau de neurone RBF a plus d'avantages dans la prédiction de PM_{2.5} et ce par rapport au modèle classique basé sur la rétropropagation [61].

Bin et al. (2015) ont présenté une méthode basée sur les réseaux de neurones à base de fonction de base radiale (RBF) pour estimer les concentrations de PM_{2.5} sur la base de données observées clairsemées. Les résultats montrent que les concentrations annuelles de PM_{2.5} estimées par le modèle RBF et exploitant des facteurs météorologiques et / ou liés à la localisation les facteurs, étaient nettement proches des concentrations observées [62].

Cet état de l'art montre un certain consensus en faveur des modèles non-linéaires basés sur les réseaux de neurones, et ce afin de prendre en considération les non linéarité contenues dans les séries temporelles à considérer. Ceci motive notre choix pour ce type d'approches dans notre présent travail.

9. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les principes de base du neurone et des réseaux de neurones, leurs caractéristiques et leur fonctionnement. Nous avons abordé dans le détail les trois modèles que nous exploitons dans cette thèse. Nous avons également mis l'accent sur l'application des réseaux de neurones dans le domaine de la surveillance de la pollution atmosphérique.

L'exploitation des trois types de réseaux abordés dans la surveillance de la qualité de l'air fera l'objet du chapitre suivant.

Référence du chapitre III

- [1] H. Wahid, Q.P. Hab, H. Duc, M. Azzi. Neural network-based meta-modelling approach for estimating spatial distribution of air pollutant levels. *Applied Soft Computing*. Vol. 13. 4087–4096, 2013.
- [2] J.P. Corriou. *Les réseaux de neurones pour la modélisation et la conduite des procédés*. Lavoisier Technique et Documentation, Paris. 1995.
- [3] F. Perez. *Les réseaux de neurones artificiels*. 2004.
- [4] Z. Filipi, Y. Wang, D. Assanis. Effect of variable geometry (VGT) on Diesel engine and vehicle system transient response. *SAE 2001 World Congress*. Detroit, MI, USA, 2001-01-1247, March 2001.
- [5] M. Ouladsine, G. Bloch, X. Dovifaaz. Neural modelling and control of a Diesel engine with pollution constraints. *Journal of Intelligent and Robotic Systems*. Springer Netherlands, 41: 157-171, February 2005.
- [6] S. Tufféry. *Data mining et statistique décisionnelle, l'intelligence dans les bases de données*. Groupe bancaire français, universités de Rennes 1 et paris Dauphine. 2005.
- [7] C. Touzet. *Les réseaux de neurones artificiels, introduction au connexionnisme, cours, exercices et travaux pratiques*. 1992.
- [8] M. Parizeau. *Réseaux de neurones*. Cours de l'Université LAVAL, Québec. 2004. <http://wcours.gel.ulaval.ca/2007/a/21410/default/5notes/titre.pdf> http
- [9] Y. Kamp, M. Hasler. *Réseaux de neurones récurrents pour mémoires associatives*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes. 1990.
- [10] F. Junod, M. Bornoz. *A la découverte des réseaux de neurones*. Yverdon. Le 7 juin 2002.
- [11] F. Tarhi. *Prédiction de l'irradiation globale pour région de tizi-ouazou par les réseaux de neurones artificiels*. Thèse de magistère université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie. 2011.
- [12] R. Mechgoug. *La Prédiction des Séries Temporelles utilisant les Paradigmes de Soft Computing*. Thèse de doctorat Université Mohamed Khider – Biskra, Algérie. 2013.
- [13] S. M. Ait cheikh. *Etude Investigation et conception d'algorithmes de commande appliqués aux systèmes photovoltaïques*. Thèse de Doctorat d'Etat en électronique, Ecole Nationale Polytechnique. 2007.
- [14] F. Elie. *Conception et réalisation d'un système utilisant des réseaux de neurones pour l'identification et la caractérisation, à bord de satellites, de signaux transitoires de type sifflement*. Thèse de Doctorat en électronique, Université d'Orléans. 1997.

- [15] G. Dreyfus. Les réseaux de neurones. Mécanique Industrielle et Matériaux, n°51. 1998.
- [16] T. Boussenou. Fusion multi-capteurs ; Application à une serre agricole. Thèse de magister de l'université Mouloud Mammeri, tizi-ouzou. 2010.
- [17] F. Vincent. Panorama des outils de prédiction en vue de leur application aux énergies renouvelables. rapport de stage, Physique & Ingénierie Conversion des Energies. 2007.
- [18] G. Cybenko. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. Mathematics of Control, Signals, and Systems 2, 303–314. 1989.
- [19] K. Hornik, M. Stinchcombe, H. White. Multilayer feedforward networks are universal approximators. Neural Networks 2(5), 359–366. 1989.
- [20] P.S. Sastry, G. Santharam, K. P. Unnikrishnan. Memory neuron networks for identification and control of dynamical systems. IEEE Transactions on Neural Networks (2), 306–319. 1994.
- [21] G.D. Magoulasb, M.N. Vrahatis, G.S. Androulakis. Improving the Convergence of the backpropagation algorithm using learning rate adaptation methods. Neural Computation 11, 1769–1796. 1999.
- [22] O. Benzaim. Techniques multi-port pour la conception et la réalisation de systèmes micro-ondes dédiés à l'évaluation non destructive de matériaux. Thèse de Doctorat en micro et nanotechnologies, acoustique et télécommunications, Université Lille 1 sciences & technologies. 2009.
- [23] A. Coman. Modélisation spatio-temporelle de la pollution atmosphérique urbaine à partir des mesures d'un réseau de surveillance de la qualité de l'air. Thèse doctorat de l'Université Paris Est, France. 2008.
- [24] M. Parrizeau. Réseaux de neurones. Presse de l'université de Laval, Automne. 2004.
- [25] S. Abdelli, K. Nouria, A. Trabelsi. Préviation du NO₂ en utilisant la méthode du réseau de neurones. Ethics and Economics, 9 (1). 2012.
- [26] N. Djabri, M. Rouainia. Forecasting NO_x and CO Pollutants Concentrations in industrial site using MLP Artificial Neural Networks. International Conference on Advanced Engineering in Petrochemical Industry (ICAEPI'17). 2017.
- [27] N. Djabri, M. Rouainia. Prédiction de la pollution industrielle par les réseaux de neurones artificiels. Conférence Internationale sur la Maintenance et la Sécurité Industrielle (CIMSI'15). 2015.
- [28] N. Djabri, . M. Rouainia. Préviation du NO₂ par la méthode des réseaux de neurones. Conférence Nationale Science et Technologies de l'Environnement (JME'15). 2015.

- [29] S. Araghinejad. *Data-Driven Modeling: Using MATLAB® in Water Resources and Environmental*. Water Science and Technology Library, Springer. 2014.
- [30] L. Ljung. *System Identification: Theory for the User*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA. 1999.
- [31] I. Leontaritis, S. Billings. *Input output parametric models for non-linear systems—part I: deterministic non-linear systems*. Sheffield Univ Applied Science Library. 1985.
- [32] E. Pisoni, M. Farina, C. Carnevale, L. Piroddi. Forecasting peak air pollution levels using NARX models. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 22:593-602. 2009.
- [33] S. Coruh, F. Geyikci, E. Kılıc, C. Ufuk. The use of NARX neural network for modeling of adsorption of zinc ions using activated almond shell as a potential biosorbent. *Bioresource Technology* 151:406-410. 2014.
- [34] N. Djabri, M. Rouainia. *Artificial Neural Networks Based Air Pollution Monitoring in Industrial Site*. International Conference on Engineering & Technology (ICET'17). IEEE_IARS Turkey section. 2017.
- [35] M. F. Bouzeffour. *Production du froid solaire par adsorption et analyse de la performance par l'application de la proche de réseaux de neurones artificiels*. Thèse doctorat de l'université de Hassiba ben boualli de chlef, Algerie. 2017.
- [36] N. Djabri, M. Rouainia. *Etude comparative sur la prédiction de la pollution industrielle par le réseau MLP et le réseau RBF*. International Conference on Maintenance and Industrial Safety (CIMSI'17). 2017.
- [37] S. Yiran, L.Y. Ding, T. Yantao, S. Yaowu. Air-fuel ratio prediction and NMPC for SI engines with modified Volterra model and RBF network. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. 45 (2015), 313.2015.
- [38] Z. Pietro, C. Haibo, C. B. Margaret. Predicting Real-Time Roadside CO and NO₂ Concentrations Using Neural Networks. *IEEE transactions on intelligent transportation systems.*, 9(3), 514. 2008.
- [39] A. I. Surajdeen, E. Moustafa, A. H. Mouhamed, A. A. Ahmed. RBF neural network inferential sensor for process emission monitoring", *Control Engineering Practice.*, 21(2013), 962. 2013.
- [40] N. Djabri, M. Rouainia. *Industrial pollution prediction by Radial Basis Function Networks*. *Journal of Environment protection Engineering*. Vol. 44(3). 2018.

- [41] A. C. Comrie. Comparing neural networks and regression models for ozone forecasting. *Journal of Air and Waste Management Association*. 47:653-663. 1997.
- [42] P. Perez , A. Trier, J. Reyes. Prediction of PM_{2.5} concentrations several hours in advance using neural networks in Santiago, Chile. *Atmospheric Environment*. 34, 1189-1196. 2000.
- [43] M. Kolehmainen, H. Martikainen, J. Ruuskanen. Neural networks and periodic components used in air quality forecasting. *Atmospheric Environment*. 35:815-825. 2001.
- [44] P. Viotti, G. Liuti, P. Di Genova. Atmospheric urban pollution : applications of an artificial neural network (ANN) to the city of Perugia. *Ecological Modelling*. 148, 27-46. 2002.
- [45] E. Balaguer Ballester, G. Camps i Valls, J.L. Carrasco-Rodriguez, E. Soria Olivas, S. del Valle- Tascon. Effective 1-day ahead prediction of hourly surface ozone concentrations in eastern Spain using linear models and neural networks. *Ecological Modelling*. 156, 27-41. 2002.
- [46] J. Kukkonen, L. Partanen, A. Karppinen, J. Ruuskanen, H. Junninen, et al. Extensive evaluation of neural networks of NO₂ and PM₁₀ concentrations, compared with a deterministic modelling system and measurements in central Helsinki. *Atmospheric Environment*. 37:4539-4550. 2003.
- [47] U. Schlink, S. Dorling, E. Pelikan, G. Nunnari, G. Cawley, et al. A rigorous inter-comparison of ground-level ozone predictions. *Atmospheric Environment*. 37:3237-3253. 2003.
- [48] F. S. Liu. Study of CNG/diesel dual fuel engine's emissions by means of RBF neural network. *Journal of Zhejiang University SCIENCE*. 5(8), 960. 2004.
- [49] M. Elshafei, M. A. Habib, M. Al-Dajani. Prediction of boilers emission using polynomial networks. *Proceedings IEEE* 1-4244-0038-4:823-827. 2006.
- [50] E. Agirre-Basurko, G. Ibarra-Berastegi, I. Madariaga. Regression and multilayer perceptron-based models to forecast hourly O₃ and NO₂ levels in the Bilbao area. *Environmental Modelling & Software*. 21:430-446. 2006.
- [51] S.I.V. Sousa, F.G. Martins, M.C.M. Alvim-Ferraz, M.C. Pereira. Multiple linear regression and artificial neural networks based on principal components to predict ozone concentrations, *Environmental Modelling & Software* 22, 97-103. 2007.

- [52] U. Brunelli, V. Piazza, L. Pignato, F. Sorbello, S. Vitabile. Two-days ahead prediction of daily maximum concentrations of SO₂, O₃, PM₁₀, NO₂, CO in the urban area of Palermo, Italy. *Atmospheric Environment*. 41, 2967-2995. 2007.
- [53] A. Kurt, B. Gulbagci, F. Karaca, O. Alagha. An online air pollution forecasting system using neural networks. *Environment International*. 34:592-598. 2008.
- [54] G. Ibarra-Berastegui, A. Elias, A. Barona, J. Saenz, A. Ezcurra, et al. From diagnosis to prognosis for forecasting air pollution using neural network: Air pollution monitoring in Bilbao. *Environmental Modelling and Software*. 23:622-637. 2008.
- [55] A. Coman, A. Ionescu, Y. Candau. Hourly ozone prediction for a 24-h horizon using neural networks. *Environmental Modelling and Software*. 23:1407-1421. 2008.
- [56] Z. Bo, S. Jianfeng. Gas Content Prediction Based on GA-RBF Neural Network, Chinese. *Control and Decision Conference*. 978(1), 3104. 2010.
- [57] L. Shourong, Z. Rongxi, M. Xin. The Forecast of CO₂ Emissions in China based on RBF Neural Networks, 2nd International Conference on Industrial and Information Systems. 7(10), 319. 2010.
- [58] L. Chuanbao, Y. Fuwu. Radical Basis Function Neural Network-Based NO_x Soft Sensor Technique, National "863" high technique study development plan for funding the project. 1(11), 1152. 2011.
- [59] K. Kyriaki, I. Lazaros. Employing a Radial Basis Function Artificial Neural Network to Classify Western and Transition European Economies Based on the Emissions of Air Pollutants and on Their Income. *International Federation for Information Processing EANN/AIAI*, 2(364), 141. 2011.
- [60] M. G. Cortina-Januchs, J. Quintanilla-Dominguez, D. Andina, A. Vega-Corona. ANN and Fuzzy c-Means Applied to Environmental Pollution Prediction. *Proceedings IEEE WAC* 1569535437:1-6. 2012.
- [61] H. Zheng, X. Shang. Study on prediction of atmospheric PM_{2.5} based on RBF neural network. *Fourth International Conference on Digital Manufacturing & Automation*. 9(13), 1287. 2013.
- [62] Z. Bin, W. Min, W. Neng, W. J. Gaines, F. Xin, T. Yuqi. Spatial modeling of PM_{2.5} concentrations with a multifactorial radial basis function neural network. *Environ. Sci. Pollut.* 3(22), 10395. 2015.

Chapitre IV

Simulation et résultats

1. Introduction

Dans ce chapitre nous procéderons à l'exploitation des trois types de RNA détaillés précédemment (MLP, NARX et RBF) dans la prédiction des concentrations des polluants NO_x et CO.

2. Description des données

Dans le troisième chapitre nous avons modélisé le nuage de pollution issu de la torche du complexe GL1K, et estimé les concentrations instantanées des polluants. L'objectif à présent est de procéder à la prédiction des concentrations de ces polluants en nous basant sur les données issues des capteurs de gaz installés dans le site.

Notre base de données qui provient de la zone industrielle de SKIKDA [Annexe] s'appuie sur les mesures quotidiennes des capteurs de gaz situés dans le site du complexe GL1K et constituées de 188 groupes de données contenant:

- la concentration de polluants (NO_x et CO) dans la zone SKIKDA, au cours de la période d'octobre 2015 à avril 2016;
- les variables météorologiques, pour la même zone et la même période, les variables mesurées sont: la vitesse et la direction du vent, l'humidité relative et la température.
- Les entrées et sorties sont normalisées dans l'intervalle [0 1].

3. Indices de performance

Pour évaluer la performance d'un modèle de prédiction on calcule souvent des indices statistiques. Parmi les indices statistiques classiques, on a décidé de calculer l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur absolue moyenne (MAE), le coefficient de corrélation (R2) et le coefficient de détermination (d_2) [1, 2, 3].

L'erreur quadratique moyenne est l'une des mesures de succès les plus couramment utilisées pour la prévision numérique. La valeur RMSE est plus petite, la performance du modèle est meilleure. Sa valeur est calculée par :

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2 \quad (\text{IV.1})$$

La racine de la moyenne de l'erreur quadratique (RMSE) -en anglais (*root mean squared error*):

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2} \quad (IV.2)$$

L'erreur absolue moyenne (MAE) est la différence moyenne entre les valeurs de données prédites et réelles. Le MAE, donné par Eq.3 va de 0 à l'infini et un ajustement parfait est obtenu quand MAE = 0.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |P_i - O_i| \quad (IV.3)$$

Le coefficient de corrélation (R2) explique dans quelle mesure la variabilité des données imputées peuvent s'expliquer par le fait qu'elles sont liées aux valeurs observées ou à la proximité des points par rapport à la ligne. R2 prend des valeurs entre 0 et 1, avec des valeurs plus proches de 1 impliquant un meilleur ajustement. Il est donné par

$$R2 = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 - \sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \right)^2} \quad (IV.4)$$

Le coefficient de détermination (d_2), qui est une mesure relative exprimant le degré auquel les prédictions sont exemptes d'erreur.

$$d_2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n |P_i - O_i|^2}{\sum_{i=1}^n (|P_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} \quad (IV.5)$$

Où P_i et O_i représentent les variables prédites et respectivement observées, tandis que \bar{O} signifie la moyenne des observations [4, 5, 6].

4. Application des réseaux de neurone pour la prédiction des concentrations de NO_x et CO

Dans ce qui suit, les trois modèles (MLP, NARX, RBF) sont exploités avec la base de données constituée de deux variables (les concentrations de polluants NO_x et CO), et chaque variable est constituée de 188 échantillon divisés en trois groupe : 60% d'apprentissage, 20% du test et 20% de validation.

4.1. Résultat de la simulation

Les courbes de comparaison entre les résultats de prédiction et les données d'observation (résultats de mesure) de deux polluant NO_x et CO , par les trois modèles (MLP, NARX et RBF) sont illustrés dans les figures (3, 5, 9, 11, 15, 17) la courbe en rouge indique les données réelles d'origine (mesure CO / NO_x), la courbe en bleu indique les résultats de la prédiction (prédiction CO / NO_x).

4.1.1. Le modèle MLP :

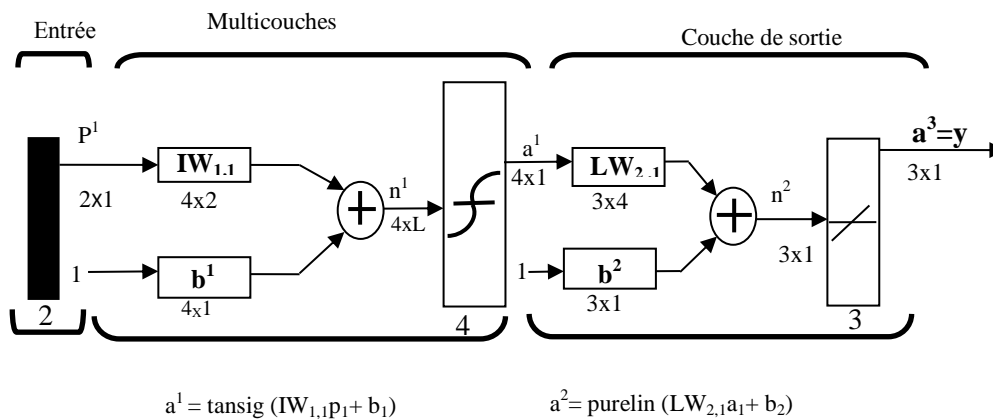


Figure IV-1 : Structure du modèle MLP

On utilise le réseau perceptron multicouche (MLP) ayant trois couches : couche d'entrée, couche cachée et couche de sortie, où le nombre de neurones entre la couche d'entrée et la couche cachée dépend du nombre des entrées et chaque neurone est activé par une fonction sigmoïde. Nous considérons un seul neurone entre la couche cachée et la couche de sortie, activé par une fonction d'activation linéaire.

Puis on calcule les erreurs quadratiques moyennes (MSE), les erreurs absolues moyennes (MAE), le coefficient de corrélation (R2) et le coefficient de détermination (d_2) pour déterminer le meilleur modèle. La simulation sous Matlab version (7.7) conduit aux résultats illustrés sur le tableau IV-1 et les figures (IV-2 _ IV-6) :

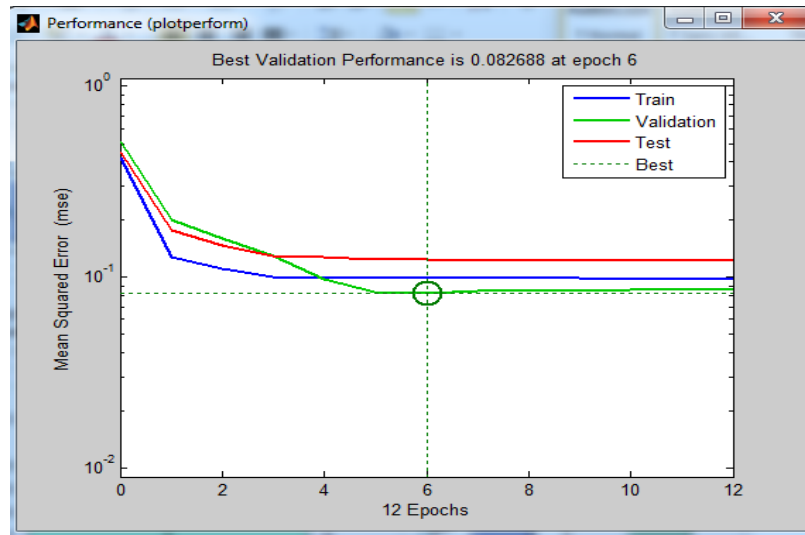


Figure IV-2 : Evolutions du MSEA, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau MLP.

Avec :

MSEA : erreur quadratique moyenne d'apprentissage (*Mean Square Error train en anglais*)

MSEV : erreur quadratique moyenne de validation (*Mean Square Error validation en anglais*)

MSET : erreur quadratique moyenne de test (*Mean Square Error test en anglais*)

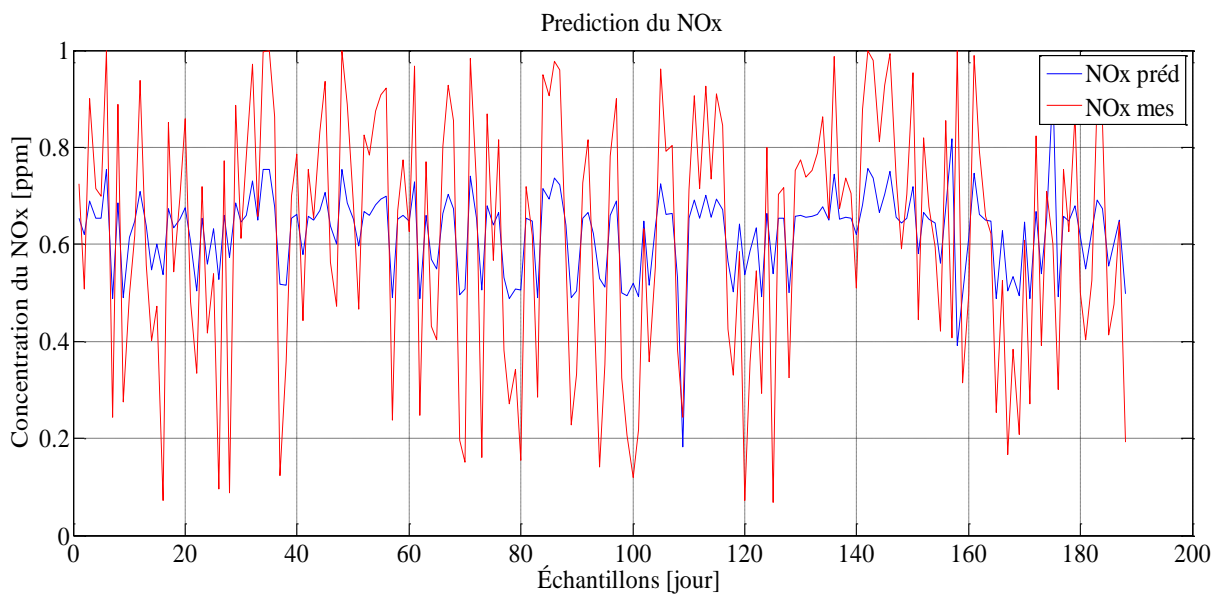


Figure IV-3 : Prédiction du NO_x par le modèle MLP

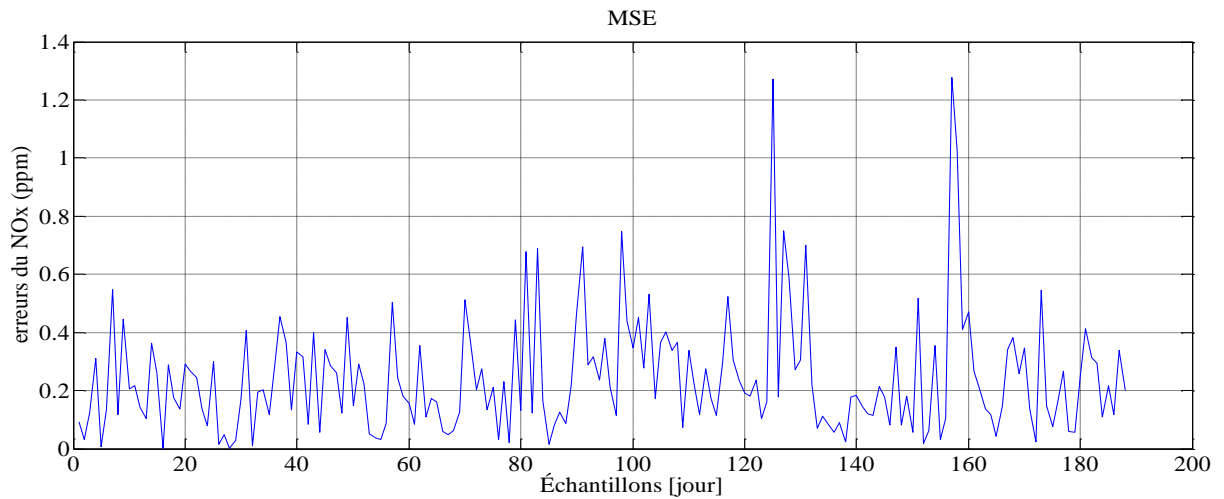


Figure IV-4 : Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle MLP

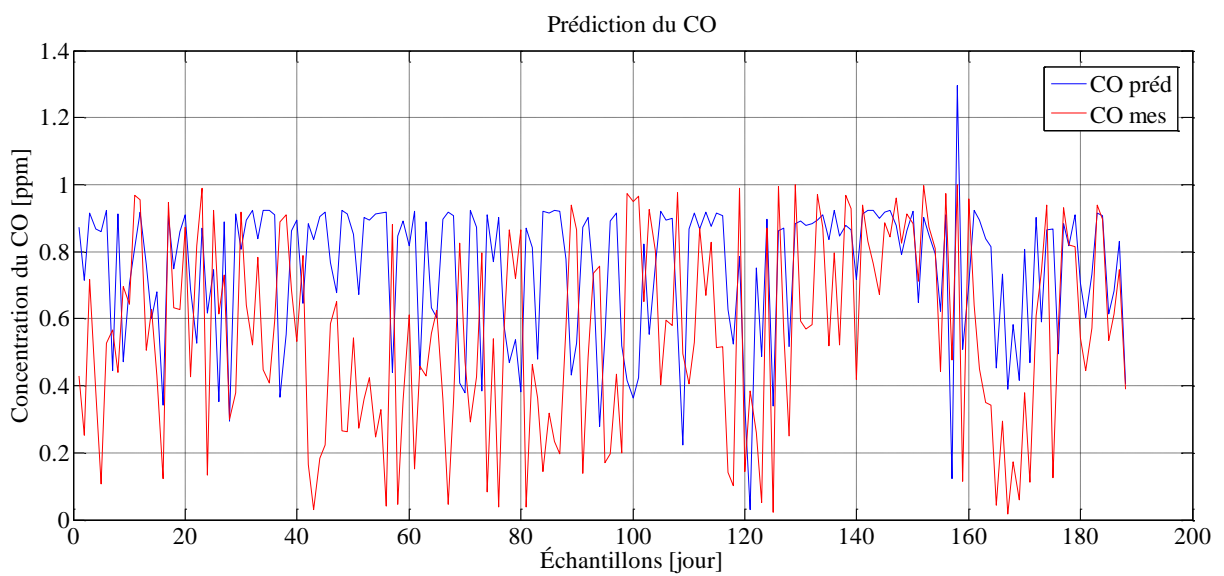


Figure IV-5 : Prédiction du CO par le modèle MLP

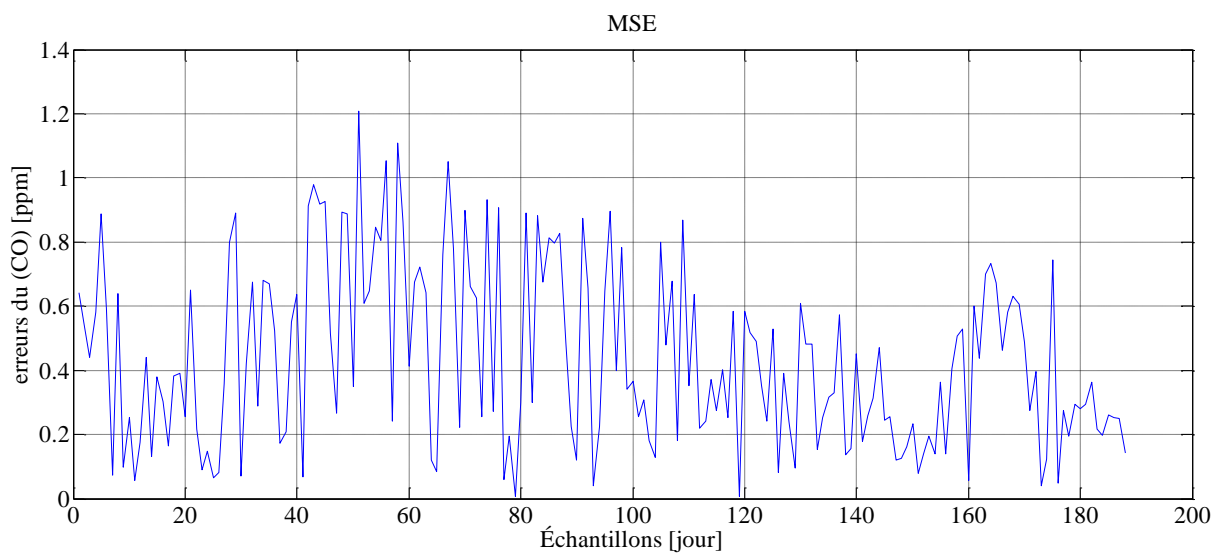


Figure IV-6 : Erreurs de prédiction du CO par le modèle MLP

Tableau IV-1 : Les performances du modèle MLP

polluants	MSE	MAE	R2	d ₂
NO _x	0.1033	0.2476	0.1054	0.2416
CO	0.1793	0.3166	0.5779	0.3722

D'après les résultats de l'exploitation du modèle MLP (fig. 2-6), nous pouvons faire les remarques suivantes :

- Dans la figure IV.2 illustrant l'évolution du MSEA, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau MLP, on remarque que la meilleure performance de validation est égale à 0.082688 à la 6^{ème} itération.
- dans les figures IV.3 et IV.5, la courbe de prédiction et la courbe de mesure pour le NO_x et CO sont convergentes. Par ailleurs, et d'après les figures IV.4 et IV.6, on remarque que les valeurs des erreurs de prédiction demeurent élevées.
- Dans les résultats illustrant les performances du modèle MLP (tableau IV.1), on remarque que les valeurs des erreurs quadratiques moyennes (MSE), des erreurs absolues moyennes (MAE), de coefficient de détermination (d₂) d'ordre Important, quant au coefficient de corrélation (R2), sa valeur est inférieure à 1 pour les deux prédictions.

4.1.2. Modèle NARX

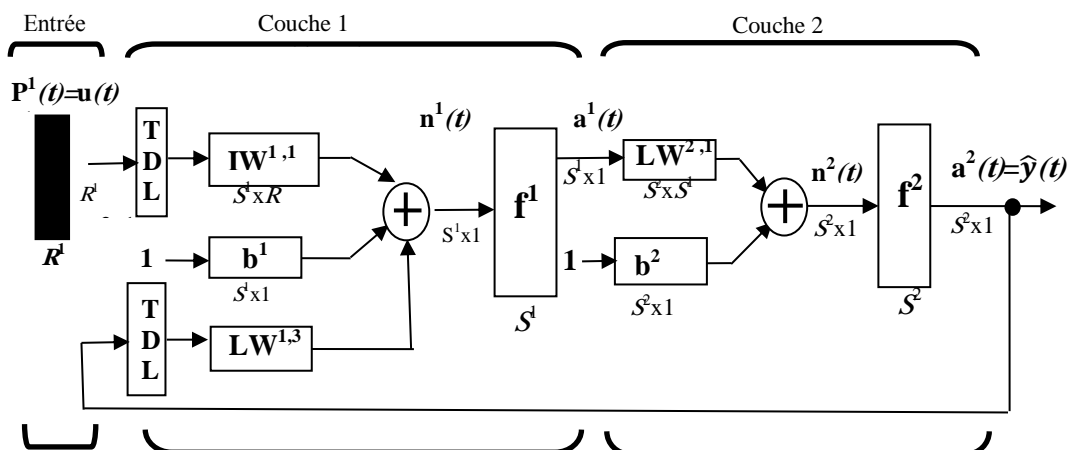


Figure IV-7 : structure du modèle NARX

On exploite à présent le réseau autorégressif non linéaire à entrées exogènes (NARX) à trois couches : couche d'entrée, couche cachée et couche de sortie, où le nombre de neurones entre la couche d'entrée et la couche cachée dépend du nombre des entrées et chaque neurone est activé par une fonction sigmoïde. Nous considérons un seul neurone entre la couche cachée et la couche de sortie, activé par une fonction d'activation linéaire.

Puis on calcule les erreurs quadratiques moyennes (MSE), les erreurs absolues moyennes (MAE), le coefficient de corrélation (R2) et le coefficient de détermination (d_2) pour déterminer le meilleur modèle. La simulation conduit aux résultats illustrés sur le tableau IV-2 et les figures (IV-8 _ IV-12) :

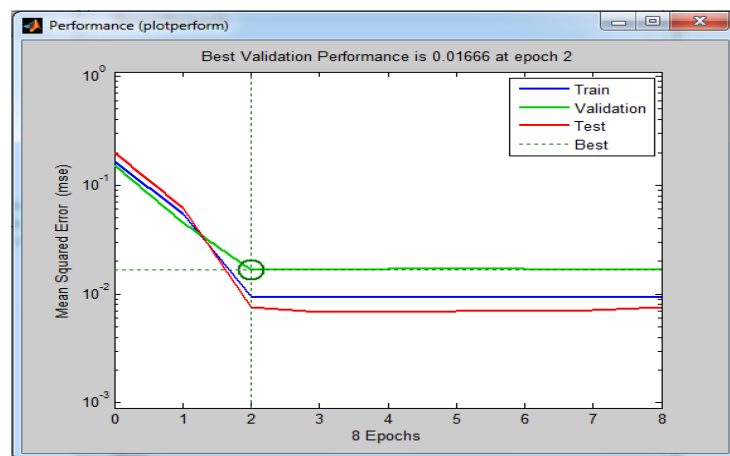


Figure IV-8 : Evolutions du MSEA, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau NARX.

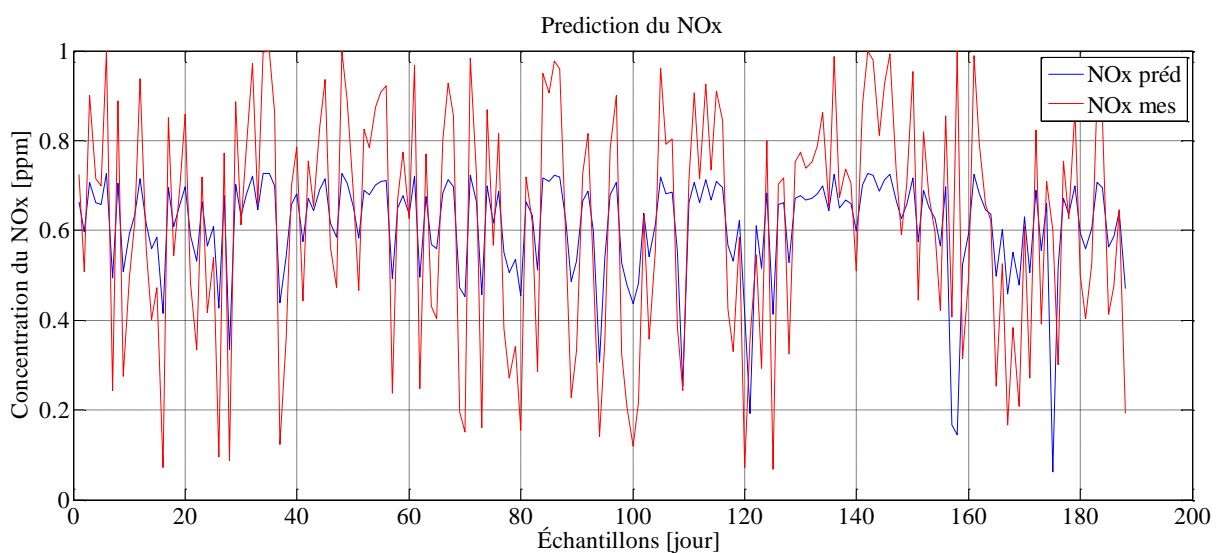


Figure IV-9 : Prédiction du NO_x par le modèle NARX

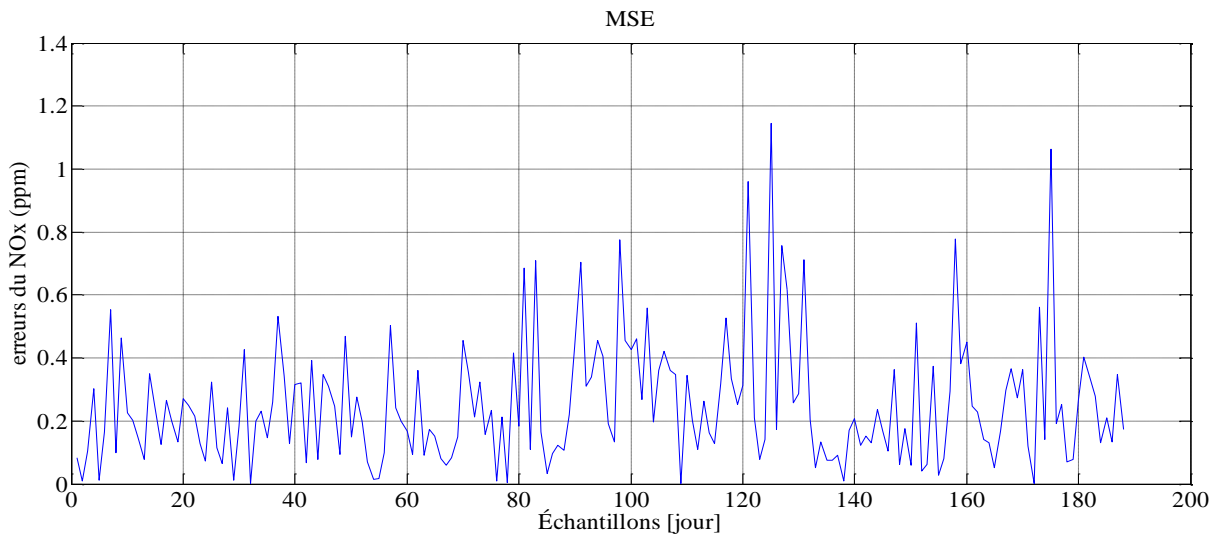


Figure IV-10 : Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle NARX

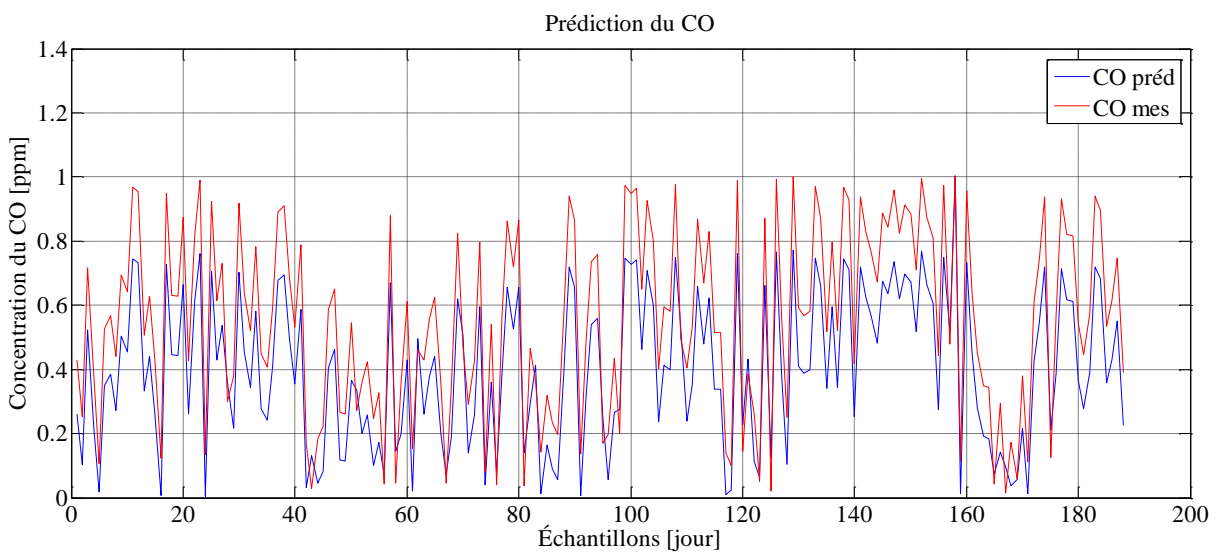


Figure IV-11 : Prédiction du CO par le modèle NARX

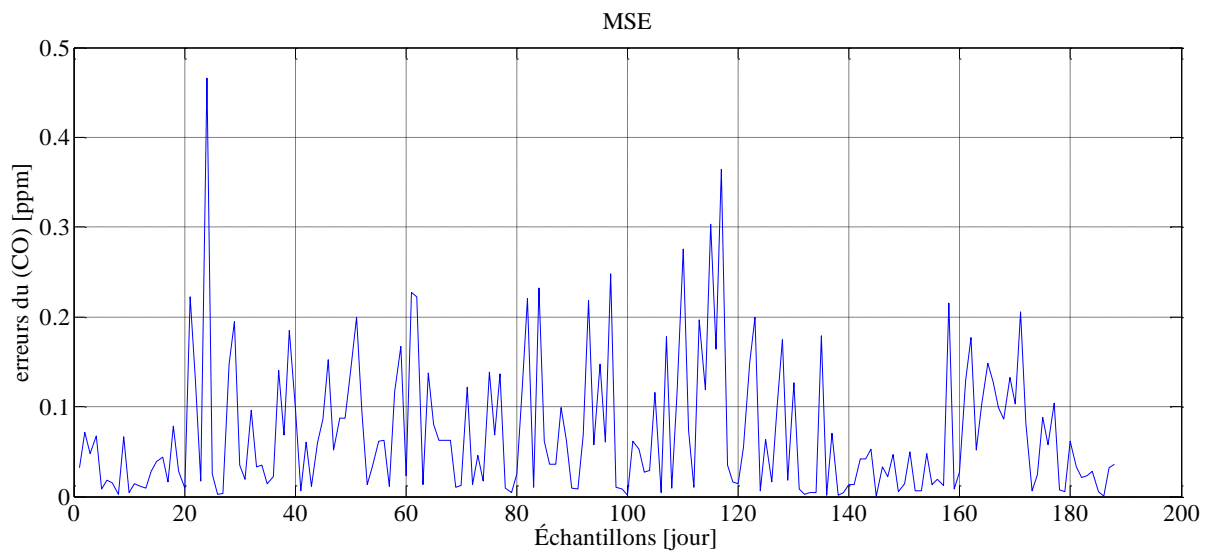


Figure IV-12 : Erreurs de prédiction du CO par le modèle NARX

Tableau IV-2 : Les performances du modèle NARX

polluants	MSE	MAE	R2	d ₂
NO _x	0.1077	0.2404	0.5668	0.2486
CO	0.0106	0.0719	0.9070	0.0384

D'après les résultats obtenus, on constate ce qui suit :

➤ Dans la figure IV-8 illustrant l'évolution du MSEA, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau NARX, on remarque que la meilleure performance de validation est égale à 0.01666 à la 2^{ème} itération.

➤ dans les figures (IV-9 et IV-11) illustrant la prédiction par le modèle NARX du NO_x et CO successivement, on remarque que la courbe de prédiction et la courbe de mesure pour le NO_x et CO sont convergentes, et dans les figures (IV-10 et IV-12) illustrant la courbe des erreurs de prédiction par le modèle NARX du NO_x et CO successivement, on remarque que leurs valeurs sont moins importantes que pour le cas du modèle MLP,

➤ Dans le tableau IV-2 illustrant les performances de la prédiction par le modèle NARX, on remarque que les valeurs des erreurs quadratiques moyennes (MSE), des erreurs absolues moyennes (MAE), de coefficient de détermination (d₂) sont d'ordre plus faible que les indices relatifs à la prédiction par le modèle MLP, et de coefficient de corrélation (R2) est d'ordre plus grand que les indices relatifs à la prédiction par le modèle MLP pour les deux polluants NO_x et CO.

4.1.3. Modèle RBF :

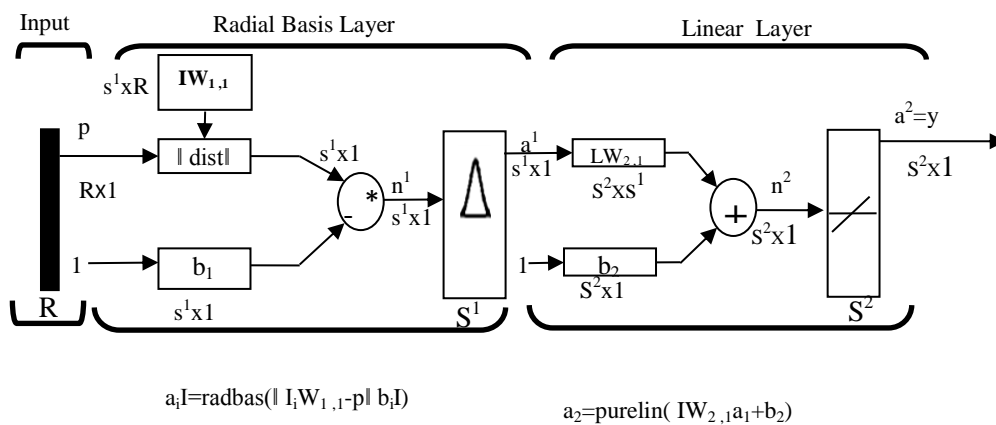


Figure IV-13 : structure du modèle RBF

Dans cette partie, nous exploitons le réseau à fonction radiale de base (RBF) de trois couches : couche d'entrée, couche cachée et couche de sortie, où le nombre de neurones entre la couche d'entrée et la couche cachée dépend du nombre des entrées et chaque neurone est activé par une fonction gaussienne.

Puis comme pour les deux modèles précédents, nous calculons les erreurs quadratiques moyennes (MSE), les erreurs absolues moyennes (MAE), le coefficient de corrélation (R2) et le coefficient de détermination (d_2) pour déterminer les performances de prédiction du modèle. La simulation conduit aux résultats illustrés sur le tableau IV-3 et les figures (IV-14 _ IV-18) :

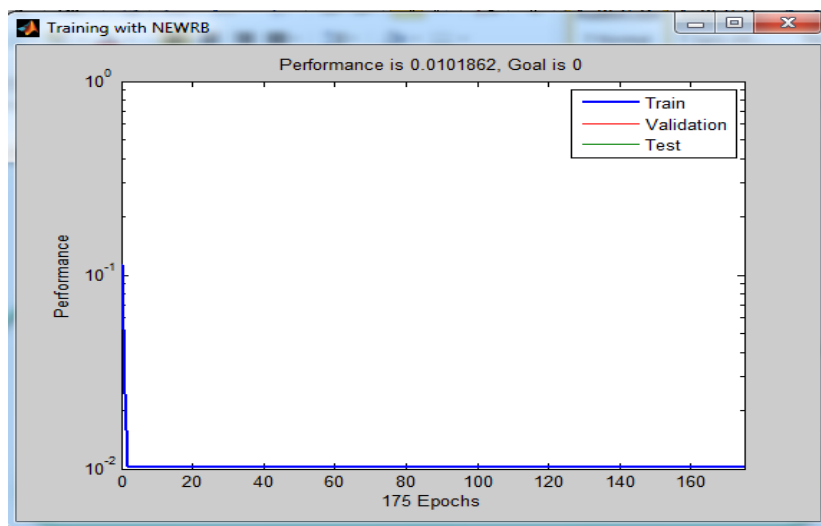


Figure IV-14 : Evolutions du MSE, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau RBF.

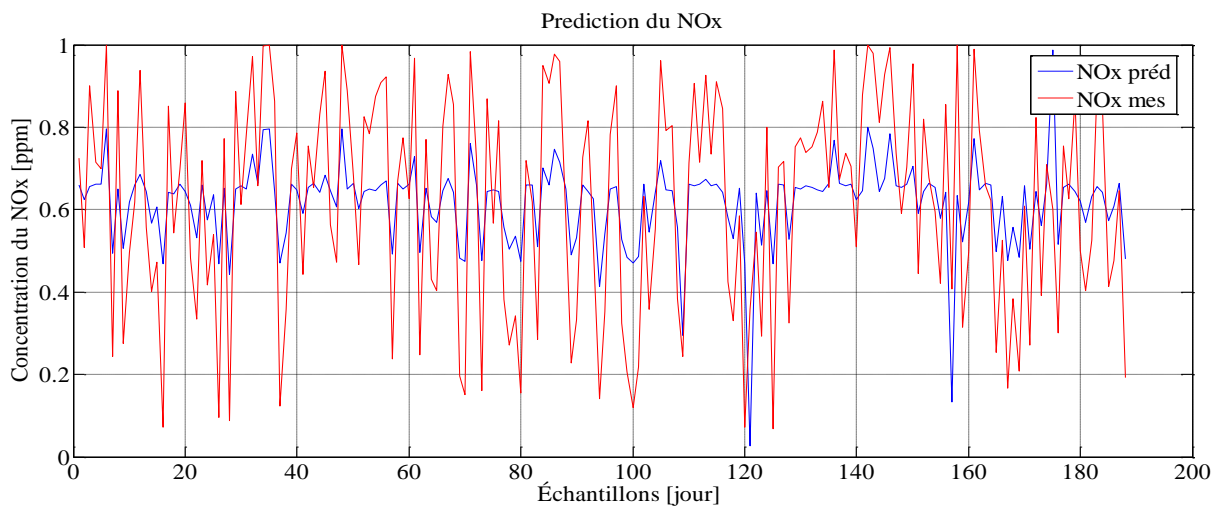


Figure IV-15 : Prédiction du NO_x par le modèle RBF

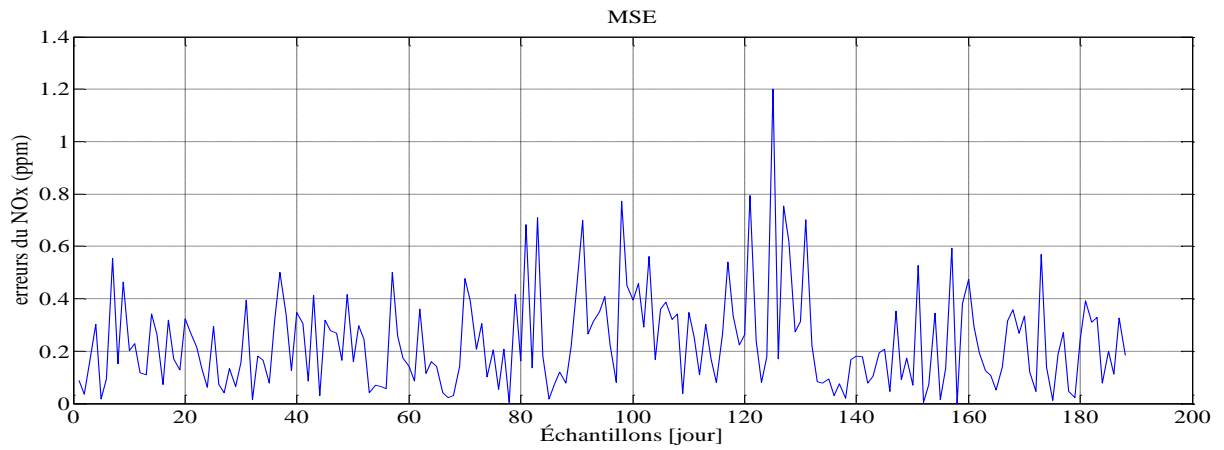


Figure IV-16 : Erreurs de prédiction du NO_x par le modèle RBF

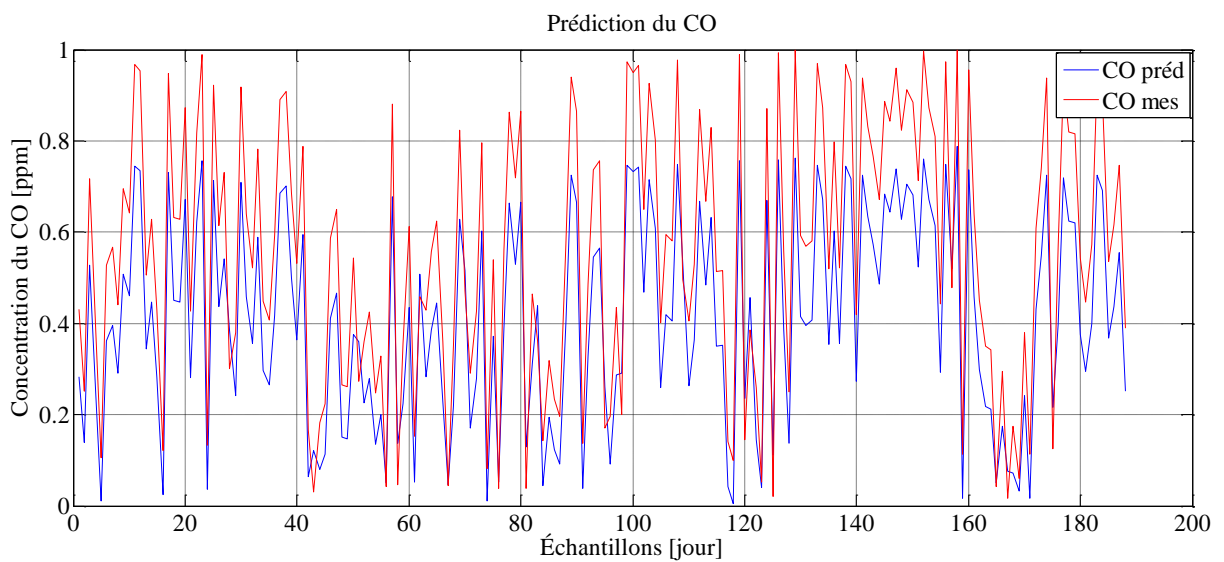


Figure IV-17 : Prédiction du CO par le modèle RBF

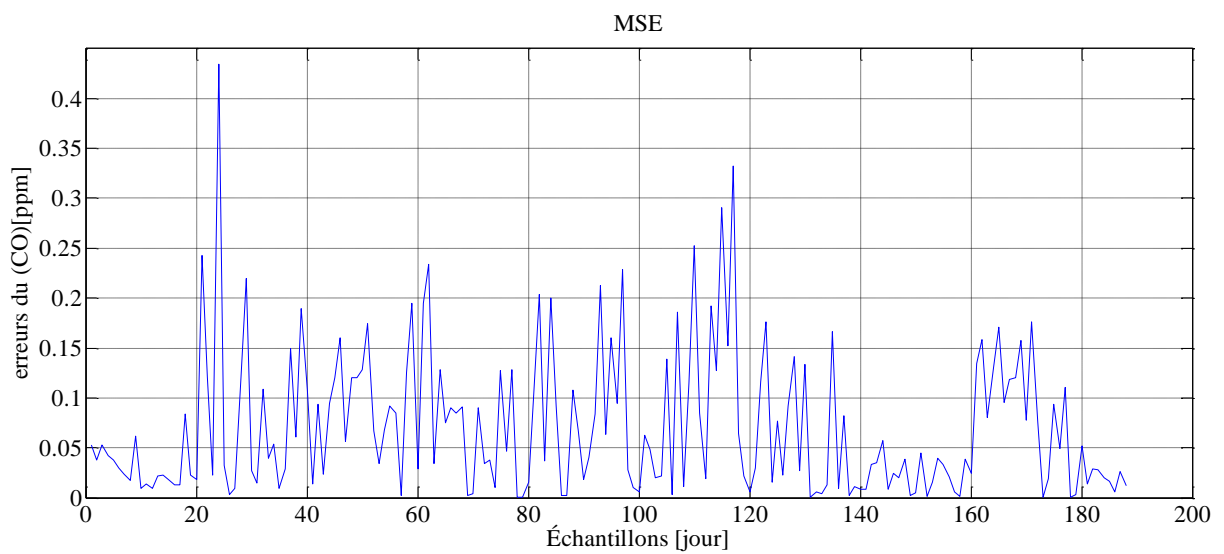


Figure IV-18 : Erreurs de prédiction du CO par le modèle RBF

Tableau IV-3 : Les performances du modèle RBF

polluants	MSE	MAE	R2	d ₂
NO _x	0.0905	0.2365	0.6160	0.2333
CO	0.0102	0.0708	0.9104	0.0539

D'après les résultats précédents, on peut constater ce qui suit :

➤ Dans la figure IV-14 illustrant l'évolution du MSEA, MSEV et MSET au cours du processus d'apprentissage du réseau RBF, on remarque que la meilleure performance de validation est égale à 0.0101862.

➤ Dans les figures IV-15, IV-17, la courbe de prédiction et la courbe de mesure pour le NO_x et CO sont plus convergentes. et d'après les figures IV-16 et IV-18, on remarque que les valeurs des erreurs de prédiction sont plus faible que dans les cas précédents (MLP, NARX).

➤ Dans le tableau IV-3 montrant les performances du modèle RBF, on remarque que les valeurs des erreurs quadratiques moyennes (MSE), des erreurs absolues moyennes (MAE), de coefficient de détermination (d₂) sont plus faibles et très proche de la valeur 0. Le coefficient de corrélation (R2) est plus proche de la valeur 1 pour les deux polluants NO_x et CO.

4.2.Comparaison des performances des trois méthodes :

Pour effectuer la comparaison entre les trois modèles, nous superposons leurs prédictions sur les figures IV-19 et IV-20 suivantes :

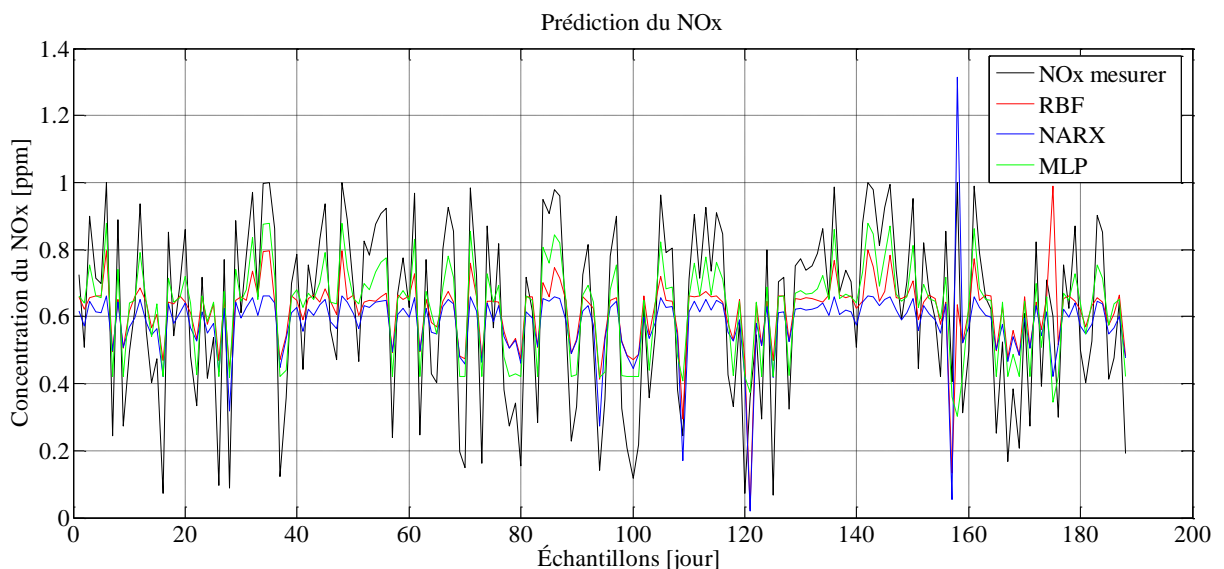


Figure IV-19 : Prédiction du NO_x par les trois modèles RBF, NARX et MLP

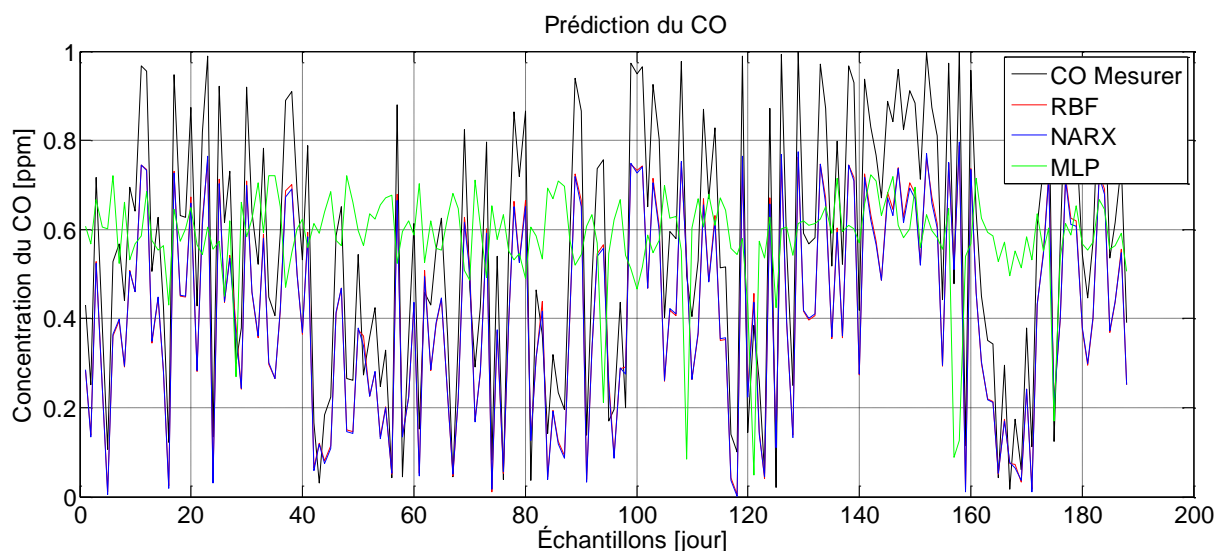


Figure IV-20 : Prédiction du CO par les trois modèles RBF, NARX et MLP

Tableau IV-4 : Comparaison des performances du NO_x et CO par les trois modèles

Modèle	polluants	MSE	MAE	R2	d ₂
RBF	NO _x	0.0905	0.2365	0.6160	0.2333
	CO	0.0102	0.0708	0.9104	0.0539
NARX	NO _x	0.1077	0.2404	0.5668	0.2486
	CO	0.0106	0.0719	0.9070	0.0384
MLP	NO _x	0.1033	0.2476	0.1054	0.2416
	CO	0.1793	0.3166	0.5779	0.3722

➤ Discussion

D'après les résultats de la prédiction par les trois modèles RBF, NARX et MLP pour NO_x et CO illustrés dans les figures IV-19, IV-20 on peut voir clairement que la courbe de prédiction par le modèle RBF est la plus convergente vers la courbe de mesure pour les deux polluants (CO et NO_x). Ce qui indique l'efficacité de la prédiction basée sur le RBF par rapport aux deux autres modèles (MLP et NARX).

Dans le tableau IV-4 présentant les indices de performances des trois prédictions effectuées, on remarque que les valeurs des erreurs quadratiques moyennes (MSE), des erreurs absolues moyennes (MAE) et de coefficient de détermination (d₂) sont plus faibles avec la prédiction par le modèle RBF. Nous pouvons également voir que les valeurs du

coefficient de corrélation (R2) dans le modèle prédictif (RBF) sont proches de la valeur "1" comparativement aux deux autres modèles (MLP et NARX). Tous ces résultats montrent l'efficacité du modèle de prédiction de la pollution basé sur le RBF et sa précision par rapport à la prédiction basée sur les deux autres modèles (MLP et NARX).

5. Amélioration de la méthode

Pour optimiser les résultats de la prédiction, nous introduisons une amélioration basée sur la considération du paramètre h de la fonction d'activation dans le modèle RBF.

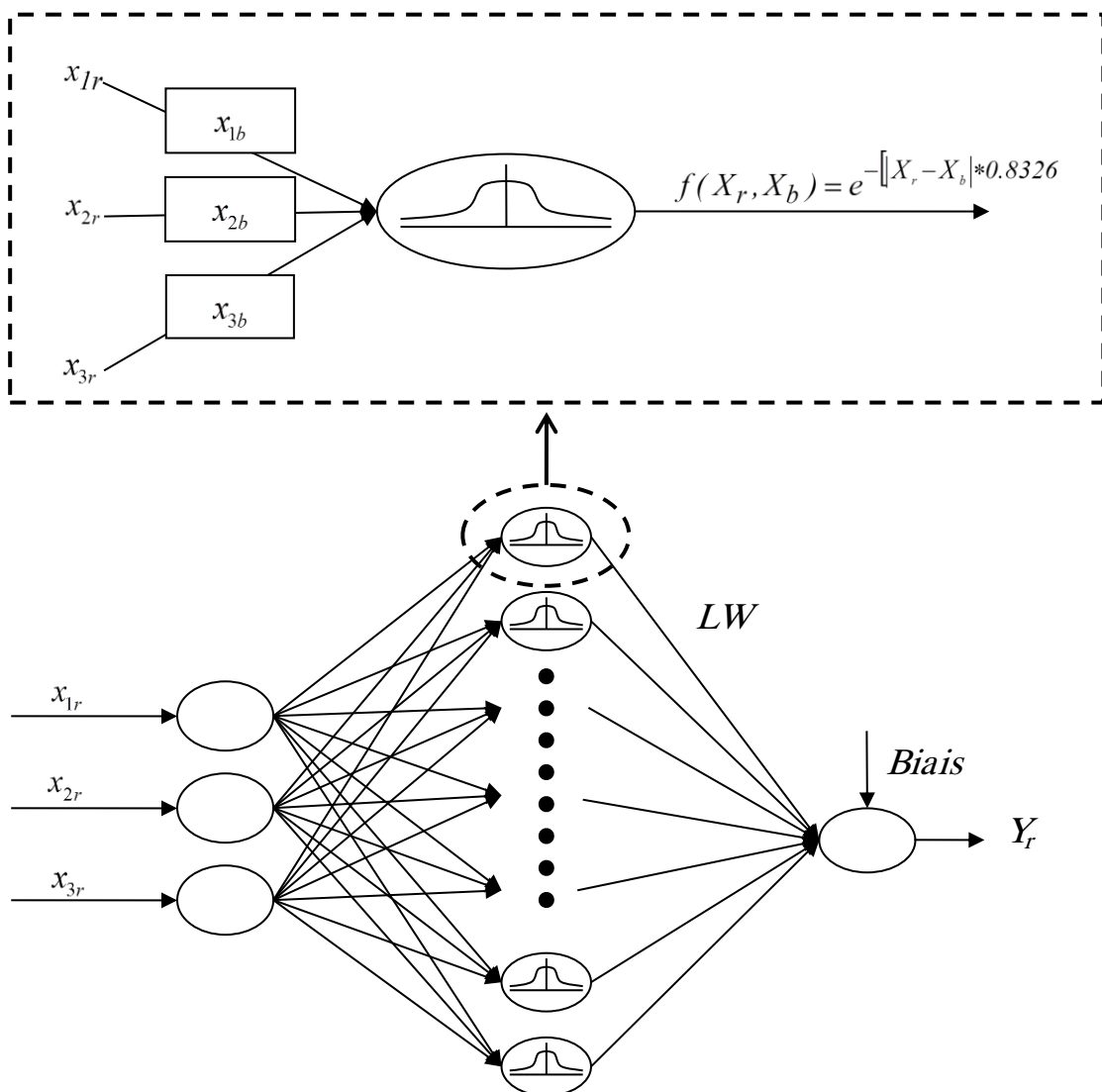


Figure IV-21 : schémas du réseau RBF

Rappelons qu'un réseau RBF est un réseau à trois couches avec une seule couche cachée (figure IV-21) : une couche d'entrée, une couche cachée et une couche de sortie, où le nombre de neurones dans la couche cachée est égale au nombre d'observations, Chaque

neurone de cette couche contient une gaussienne et réalise une fonction noyau. Ces neurones calculent la distance de l'entrée à leur noyau et répondent par une activation en proportion de cette distance. La sortie du réseau est simplement une combinaison linéaire des sorties des neurones RBF multipliés par le poids de leur connexion respective, ces neurones de sorties sont généralement animés par une fonction d'activation linéaire.

Un neurone du réseau RBF (figure IV-21) utilise une fonction d'activation gaussienne. L'entrée de cette fonction est l'Euclidien distance entre chaque entrée au neurone et le vecteur spécifié de la même taille de l'entrée.

Le principale paramètre du réseau RBF est la largeur des gaussienne qui dépend du paramètre h . Toute modification de ce paramètre entraîne donc directement un changement du comportement du réseau.

5.1. Détermination du meilleur paramètre de propagation pour l'interpolation des concentrations

Nous utilisons une approche basée sur l'évaluation de l'application de différentes valeurs du paramètre de propagation variant de 0,1 à 6 avec des étapes incrémentielles de 0,1. Il convient de noter que puisque le réseau de base radiale agit comme la fonction d'estimation exacte, l'application de différentes valeurs de propagation dans l'ensemble d'étalonnage aboutit à une erreur moyenne nulle. Par conséquent, pour examiner les performances du réseau d'une manière pratique, l'approche de la validation croisée est utilisée. Dans cette approche, chaque paire d'entrée / sortie est omise de l'observation de l'ensemble de données une fois et les $n-1$ paires de données sont utilisées pour estimer l'ensemble omis. Cette itération est répétée n fois et l'erreur de prédiction moyenne pour toutes les n paires de données est considérée comme l'indicateur de la performance du réseau.

Les étapes algorithmiques suivantes (figure V.22) sont utilisées pour décrire l'approche appliquée pour déterminer le paramètre de propagation h minimisant l'erreur moyenne d'estimation de la concentration.

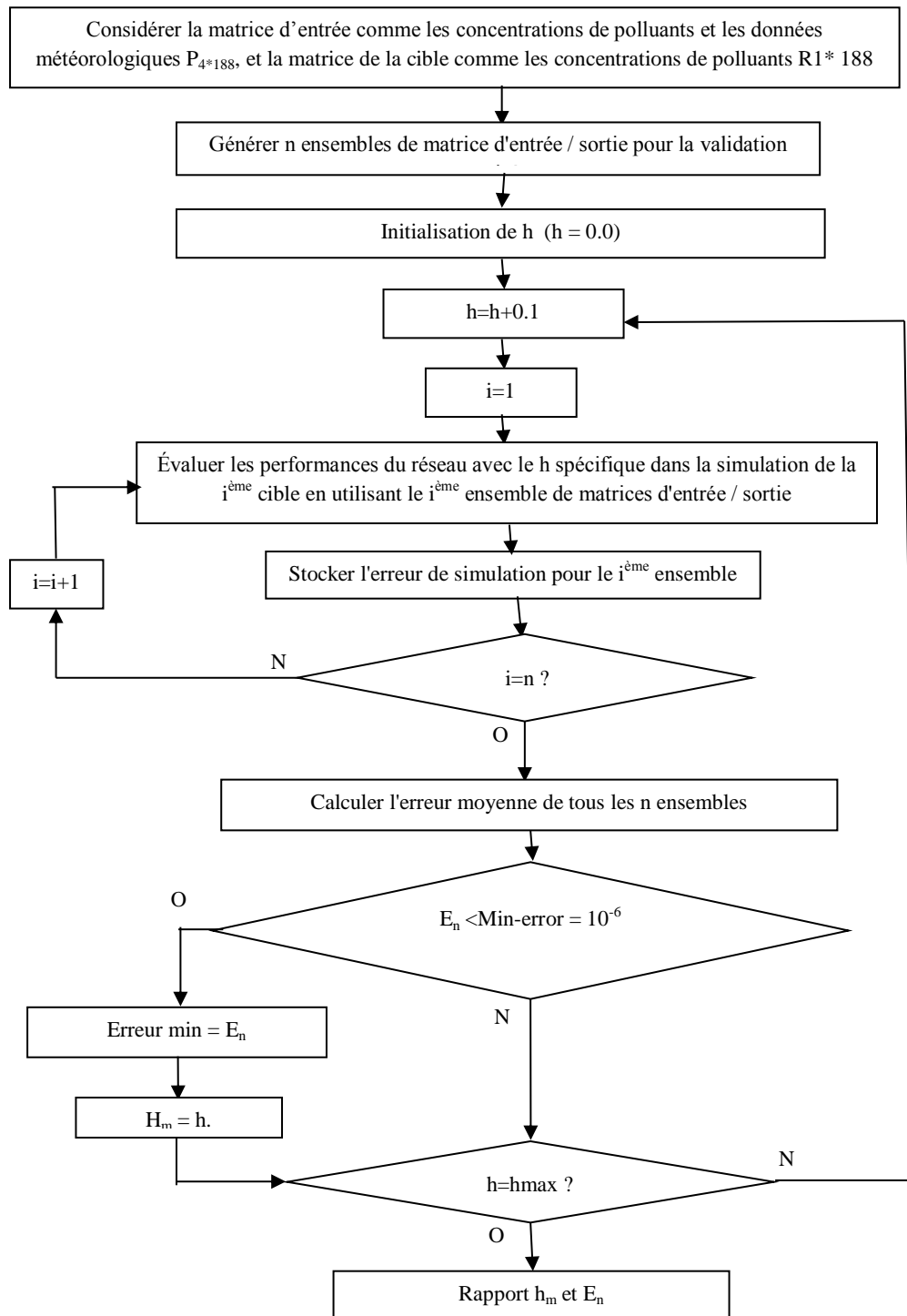


Figure IV-22 : Algorithme d'estimation de h_m

5.2. Développement de la Méthode

Le meilleur paramètre h_m de la fonction d'activation gaussienne est sélectionné en déterminant l'erreur minimale du modèle RBF en trois phases: dans la première phase, seules les variables météorologiques sont utilisées (RBF1). Dans la deuxième phase, seules les concentrations de polluants sont utilisées (RBF2). Dans la dernière phase, nous utilisons les concentrations de polluants combinées avec les variables météorologiques sélectionnées (RBF3). Nous considérons la meilleure propagation (h_m) selon chaque cas pour présenter la prédiction de deux polluants (CO et NO_x) et leurs erreurs de prédiction. Pour identifier le meilleur modèle, on calcule l'erreur quadratique moyenne (MSE) et l'erreur absolue moyenne (MAE) pour les trois cas.

Les Figures IV-23, IV-24 et IV-25 présentent les résultats obtenus après application de la méthode. Les variables des modèles sont indiquées dans le tableau IV-5.

Tableau IV-5 : Variables des modèles

Variabes	Description
X ₁	Température
X ₂	Humidité
X ₃	Vitesse du vent
X ₄	Direction du vent
X ₅	Concentrations (NO _x)
X ₆	Concentrations (CO)

5.3. Résultats et discussion

Tableau IV-6 : Valeurs de h_m et MAE pour les trois cas (RBF1, RBF2 et RBF3)

modèles	h_m	MAE
RBF1	6.0000	0.0853
RBF2	1.2000	0.1207
RBF3	5.8000	<u>0.0534</u>

Tableau IV-7 : Évolution de l'erreur absolue moyenne en fonction de la propagation à RBF3

Intervalle de propagation	Meilleur propagation	MAE
[0,2]	0.8000	0.1128
[0,4]	0.8000	0.1128
[0,6]	5.8000	<u>0.0534</u>
[0,8]	8.0000	0.0651

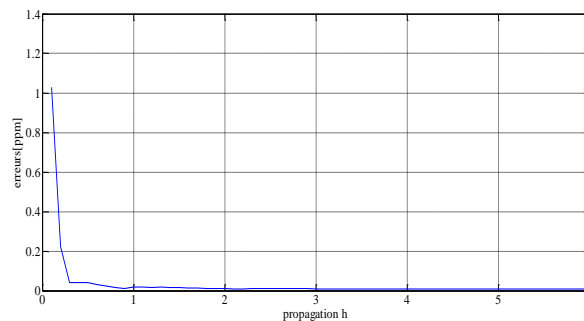


Figure IV-23 : Erreur de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF1 (en utilisant uniquement des concentrations de polluants comme entrées) pour $h \in [0, 6]$

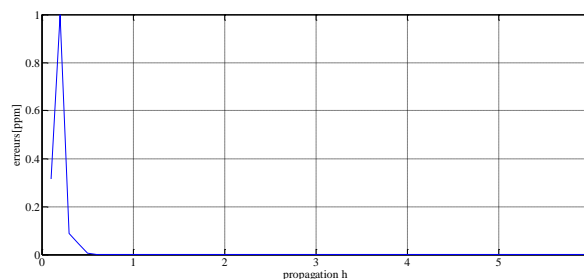


Figure IV-24 : Erreur de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF2 (en utilisant uniquement des variables météorologiques comme entrées) pour $h \in [0, 6]$

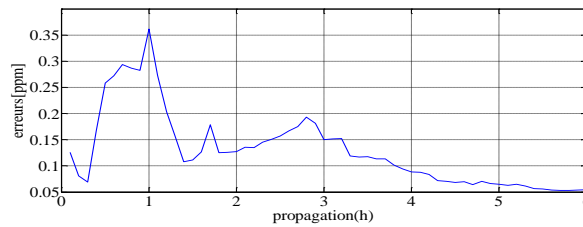


Figure IV-25 : Erreurs de prédiction en termes de MAE pour différentes valeurs du paramètre de propagation h pour l'architecture RBF3 (les concentrations de polluants sont combinées avec les variables météorologiques en tant qu'entrées) pour $h \in [0, 6]$

D'après les résultats des variations de l'erreur de prédiction minimale avec la variation de h pour les trois cas illustrés dans les figures IV-23, IV-24 et IV-25, le MAE pour les trois cas indiqués dans le tableau IV-6, on constate que la plus petite MAE est obtenue dans le cas de RBF3 (0,0534), alors que la meilleure valeur de meilleure propagation h_m est égale à 5,8. Le tableau IV-7 montre les meilleures valeurs de propagation à plusieurs intervalles pour le même cas. Par conséquent, le meilleur choix pour la valeur de propagation est 5,8.

Les figures IV-26, IV-27 et IV-28 illustrent la prédiction des polluants et les erreurs de prédiction à $h_{meilleur}$ (h_m) pour chaque cas (RBF1, RBF2 et RBF3), tandis que le tableau 8 présente les erreurs de prédiction moyenne et absolue à h_m .

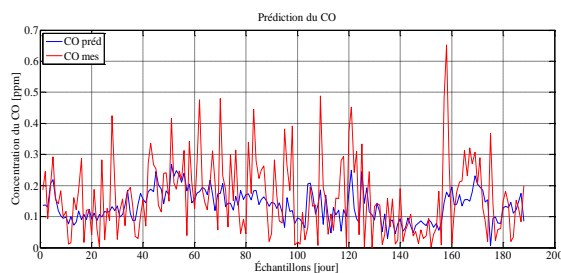


Fig.(26.a) Prédiction du CO à h_m .

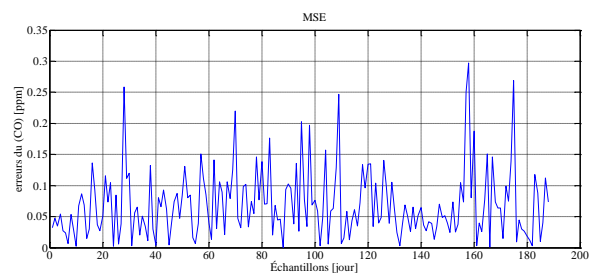


Fig. (26.b) Erreurs de prédiction de CO à h_m .

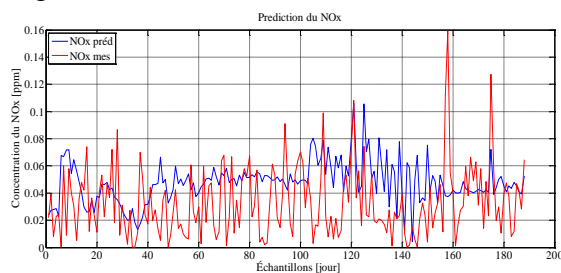


Fig. (26.c) Prédiction du NO_x à h_m .

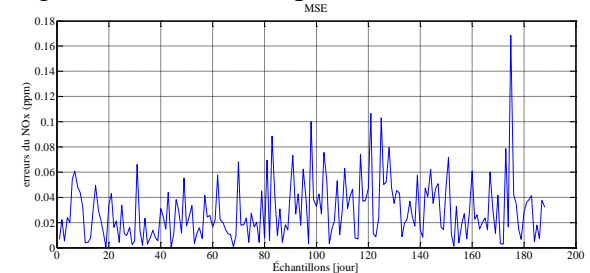


Fig. (26.d) Erreurs de prédiction de NO_x à h_m .

Figure IV-26 : Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF1

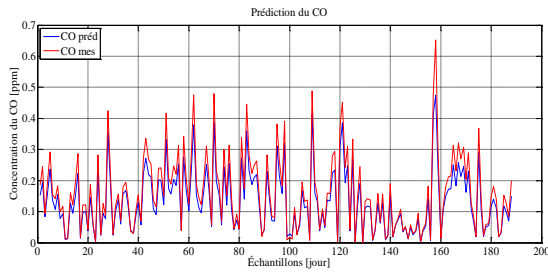
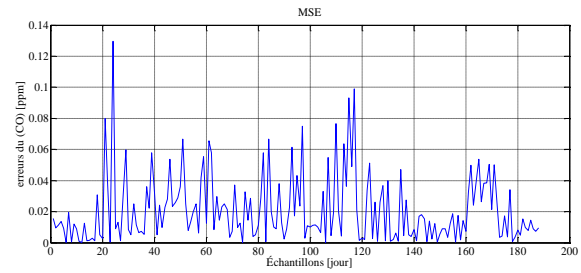
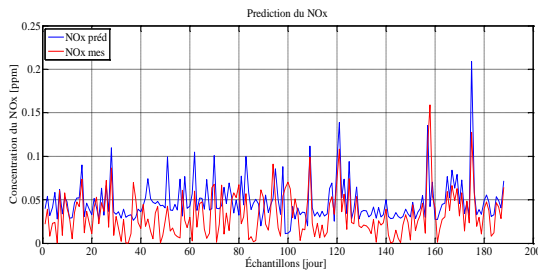
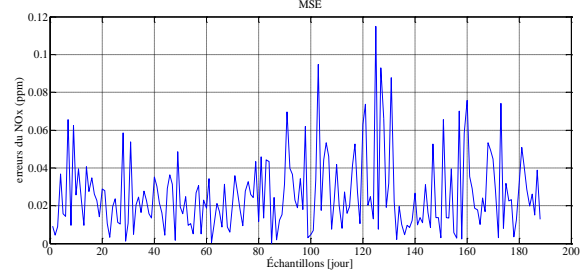
Fig. (27.a) Prédiction du CO à h_m .Fig. (27.b) Erreurs de prédiction de CO à h_m .Fig.(27.c) Prédiction du NO_x à h_m .Fig. (27.d) Erreurs de prédiction de NO_x à h_m .

Figure IV-27 : Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF2

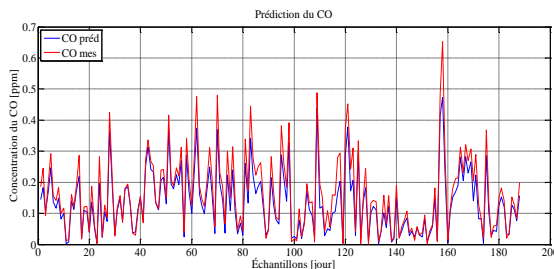
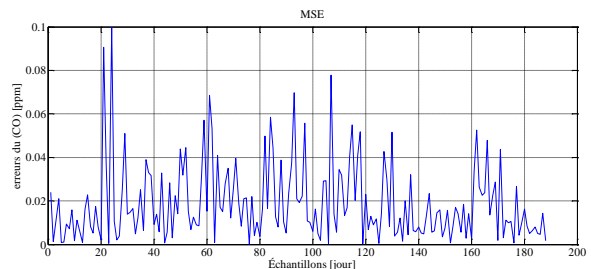
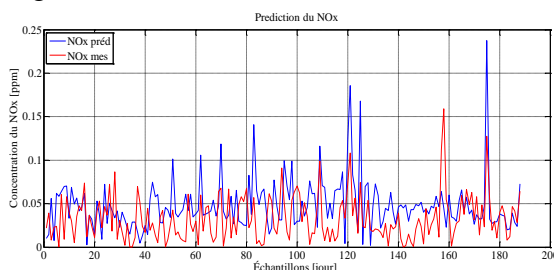
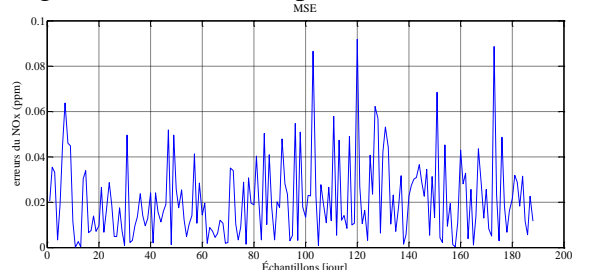
Fig. (28.a) Prédiction du CO à h_m .Fig. (28.b) Erreurs de prédiction de CO à h_m .Fig.(28.c) Prédiction du NO_x à h_m .Fig. (28.d) Erreurs de prédiction de NO_x à h_m .

Figure V-28 : Prédictions de polluants et leurs erreurs par RBF3

Selon les résultats illustrés sur les figures IV-26, IV-27 et IV-28, nous pouvons remarquer que les courbes des concentrations de CO et de NO_x prédites et mesurées sont plus rapprochées de celles mesurées sur la Figure IV-28. Pour les erreurs de prédiction, nous pouvons constater que les erreurs de prédiction pour NO_x et CO dans la figure IV-28 ont également un ordre de grandeur le plus faible.

D'après la Figure IV-28 correspondant à l'exploitation du modèle RBF3, on peut facilement conclure que ce modèle présente de meilleures performances que le modèle RBF1 et le modèle RBF2 pour la prévision des polluants NO_x et CO.

Tableau IV-8 : Erreurs quadratiques moyennes et erreurs absolues moyennes pour les trois cas (RBF1, RBF2 et RBF3)

Modèle	Concentration du NO _x [ppm]			Concentration du CO [ppm]		
	MSE	MAE	R2	MSE	MAE	R2
RBF1	0.0014	0.0293	0.5398	0.0079	0.0695	0.2374
RBF2	0.0011	0.0261	0.3464	$9.0063 \cdot 10^{-4}$	0.0209	0.9127
RBF3	<u>$5.2243 \cdot 10^{-4}$</u>	<u>0.0174</u>	<u>0.5398</u>	<u>$6.0510 \cdot 10^{-4}$</u>	<u>0.0180</u>	<u>0.9349</u>

D'après le tableau IV-8, il apparaît que les valeurs des erreurs quadratiques moyennes (MSE), les erreurs absolues moyennes (MAE) pour les deux polluants dans le modèle prédictif (RBF3) sont plus faibles que leurs valeurs dans les modèles prédictifs RBF1 et RBF2. Nous pouvons également voir que les valeurs du coefficient de détermination (R2) dans (RBF3) sont meilleures que dans le cas de RBF1 et RBF2.

Tous ces résultats montrent l'efficacité du modèle de prédiction de la pollution basé sur RBF3 et sa précision comparée à la prédiction basée sur RBF1 et RBF2, on peut conclure que MSE et MAE minimum pour les deux polluants sont obtenues avec le modèle RBF3. Ainsi, l'utilisation de concentrations de polluants combinées avec des variables météorologiques conduit à une meilleure prédiction.

6. Conclusion

Ce chapitre était consacré à l'application des méthodes basées sur les réseaux de neurones (que nous avons abordées dans le chapitre précédent) pour la surveillance et le suivi de la concentration de deux polluants (NO_x et CO). L'objectif était également de valider un modèle optimal pour prédiction de la pollution.

Notre analyse nous a amené à conclure que l'utilisation de l'approche basée sur le modèle RBF dans tous les cas est plus efficace que les deux autres méthodes basées sur le modèle MLP et le modèle NARX.

Nous avons également introduit une amélioration dans le modèle sélectionné et basée sur le paramètre de propagation h de la fonction d'activation gaussienne dans le réseau RBF. Nous avons procédé en trois phases afin d'obtenir le meilleur paramètre : dans la première phase, seules les variables météorologiques sont utilisées nommées (RBF1). Dans la deuxième phase, seules les concentrations de polluants sont utilisées nommées (RBF2). Dans la dernière phase, nous utilisons les concentrations de polluants combinées avec les variables météorologiques nommées (RBF3). Les résultats obtenus ont montré que la meilleure propagation et la meilleure prédiction sont obtenues dans le troisième cas (RBF3). Ainsi, on peut conclure que la prédiction efficace des polluants NO_x et CO est obtenue en utilisant le réseau de neurone à fonction radiale de base avec une valeur optimale du paramètre de propagation " $h = 5,8$ ", et un ensemble de données contenant des concentrations de polluants couplé avec les données météorologiques.

Ce choix du paramètre h combiné avec l'exploitation des quatre paramètres météorologiques nous ont permis d'aboutir à une méthode automatisée efficace dédiée à la prédiction et donc la surveillance des concentrations de polluants atmosphériques.

Remarquons que la méthode est applicable pour tous autres polluants que ceux que nous avons considérés dans notre travail.

Références du chapitre IV

- [1] C. Willmott. Some comments on the evaluation of the model performance, *Bulletin of the American Meteorological Society*. 63 (11), 1309. 1982.
- [2] C. Willmott, S. Ackleson, R. Davis, J. Feddema, K. Klink, D. Legates, J. O'Donnell, C. Rowe. Statistics for the evaluation and comparison of models, *Journal of Geophysical Research*. 90 (5), 8995. 1985.
- [3] S. M. Roeson, D. G. Steyn. evaluation and comparison of statistical forecast models for daily maximum ozone concentrations. *Atmospheric Environment*. 24(2), 303. 1990.
- [4] A. Coman, A. Ionescu, Y. Candau. Hourly ozone prediction for a 24-h horizon using neural networks. *Environmental Modelling & Software*. 23 (2008), 1407. 2008.
- [5] H. Junninen, H. Niskaa, K. Tuppurainen, J. Ruuskanen, M. Kolehmainen. Methods for imputation of missing values in air quality data sets. *Atmospheric Environment*. 38 (2004), 2895. 2004.
- [6] M. Kolehmainen, H. Martikainen, J. Ruuskanen. Neural networks and periodic components used in air quality forecasting. *Atmospheric Environment*. 35, 815-825. 2001.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion Générale

L'objectif de ce travail était d'apporter une contribution à la surveillance de la pollution atmosphérique. Nous nous sommes focalisés sur deux aspects : le premier était consacré à la modélisation de la pollution atmosphérique permettant le suivi spatial des concentrations de polluants atmosphériques en utilisant des méthodes basées sur le modèle de chimie transport ; le second aspect a été concentré sur la prévision temporelle des niveaux de polluants en utilisant trois types de réseaux de neurones artificiels pour identifier le modèle le plus performant permettant de prédire l'évolution de la concentration des polluants dans l'atmosphère à partir d'une base de données obtenue dans le site du complexe GL1K- SKIKDA.

Pour la détection spatiale de la pollution nous avons étudié et analysé l'évolution de la concentration des polluants qui sont dégagés par la torche, et réalisé la modélisation numérique par des modèles de chimie-transport (modèle de dispersion atmosphérique résolu par l'équation gaussienne) pour le suivi spatial des concentrations des polluants. Les données exploitées ont été combinées avec les données météorologiques. Les résultats obtenus ont montré l'efficacité du modèle gaussien pour la résolution du modèle considéré et la robustesse dans la détection et l'évaluation des concentrations des polluants spatialement.

Dans la deuxième et principale partie de notre travail qui traitait la surveillance des polluants, nous nous sommes orientés vers l'exploitation par la prédiction des concentrations des réseaux de neurones artificiels. Nous avons exploité et appliqué pour cela trois modèles de réseaux de neurones artificiels : MLP, NARX et RBF. La comparaison des résultats a montré que le modèle RBF était le plus efficace pour estimer les concentrations des polluants et que ses performances sont meilleures par rapport à celles de la méthode basée sur les deux autres modèles MLP et NARX. Par la suite, et pour améliorer la méthode, nous avons apporté une modification dans le modèle RBF basée sur le paramètre h de la fonction d'activation dans ce modèle. Nous avons procédé en trois phases afin d'obtenir le meilleur paramètre.

Les résultats obtenus ont montré que la meilleure propagation et la meilleure prédiction sont obtenues dans le dernier cas où nous avons utilisé les concentrations de polluants combinées avec les variables météorologiques.

Ainsi, nous pouvons conclure que la prédiction efficace des polluants NO_x et CO est obtenue en utilisant le réseau de neurone à fonction radiale de base avec une valeur

Conclusion Générale

optimale du paramètre de propagation, et un ensemble de données contenant des concentrations de polluants combiné avec les données météorologiques.

Comme perspective à notre étude nous envisageons :

- D'utiliser d'autres types de modèles de réseaux de neurone pour la prédiction de la pollution industrielle, ou des méthodes hybrides telle que celles combinant la logique floue avec les réseaux de neurones.
- De prédire la pollution de l'air à des échelles temporaires plus réduits (heure, minute), et à des échelles spatiales plus larges.
- De prévoir la pollution atmosphérique par des approches de concaténation spatio-temporelle à deux ou trois modèle couplée en série ou en parallèle selon les données du site et les modèles adopté.

Annexe

1. Présentation du complexe « GL1/K »

Le complexe comprenait principalement 06 trains de liquéfaction (U10, 20, 30, 40, 5P, 6P) avant l'incident du 19 janvier 2004, et il n'en reste que :

- Trois unités de liquéfaction du gaz (U10, 5P, 6P).
- 01 unité de fractionnement de GPL.
- 01 unité de stockage et d'expédition de GNL, l'unité 80.
- 01 unité auxiliaire pour la fourniture d'eau (distillée, déminéralisée, eau de mer), de vapeur, d'air et d'azote, l'unité 50 « utilité ».
- 01 unité 70 de stockage d'eau.

Le gaz naturel, GN, provenant des gisements de HANSI R'MEL arrive au complexe GL1K à 40 bars dans un gazoduc de 40'' de diamètre. Le gaz est comprimé dans 05 stations de compression tout le long du gazoduc.

Le gaz naturel liquéfié est un gaz naturel qui a été soumis à un processus physique pour le rendre liquide à -165°C et 1,2 bar. Dès lors d'1 m³ du gaz naturel liquide équivalant à 600 m³ du gaz à l'état gazeux. Le transport du gaz naturel par METHANIER n'est possible qu'après une opération de liquéfaction (C'est le rôle du complexe). IL nécessite une réduction considérable du volume du gaz naturel. Le GLIK est alimenté en gaz naturel à partir du gisement de HASSI R'MEL par un gazoduc d'une longueur de 580 Km et 40 pouces de diamètre, à travers cinq stations de compression tout le long du gazoduc.

Le complexe de liquéfaction gaz de SKIKDA (GL1K) a été créé en application de l'accord du 29-07-1965, par convention de Juillet 1967 entre le gouvernement Algérien et le gouvernement Français. Le capital de la " SOMLGAZ " est souscrit par la société nationale algérienne "SONATRACH" à 50% et par le groupe français " ERAP " à 50%, après de longues négociations qui ont durées une année, la réalisation de l'usine du GLK a été confiée à la société " TECHNIP " le 14 - 12- 1968. Un groupe de quatre sociétés françaises:

- C.E.M. Compagnie électro-mécanique.
- C.M.I : Construction métallique et d'installation.
- C.I.T.E.C : Société de construction et d'installation technique.
- SOTRABAS : Société de travaux Bagottes - savoir.

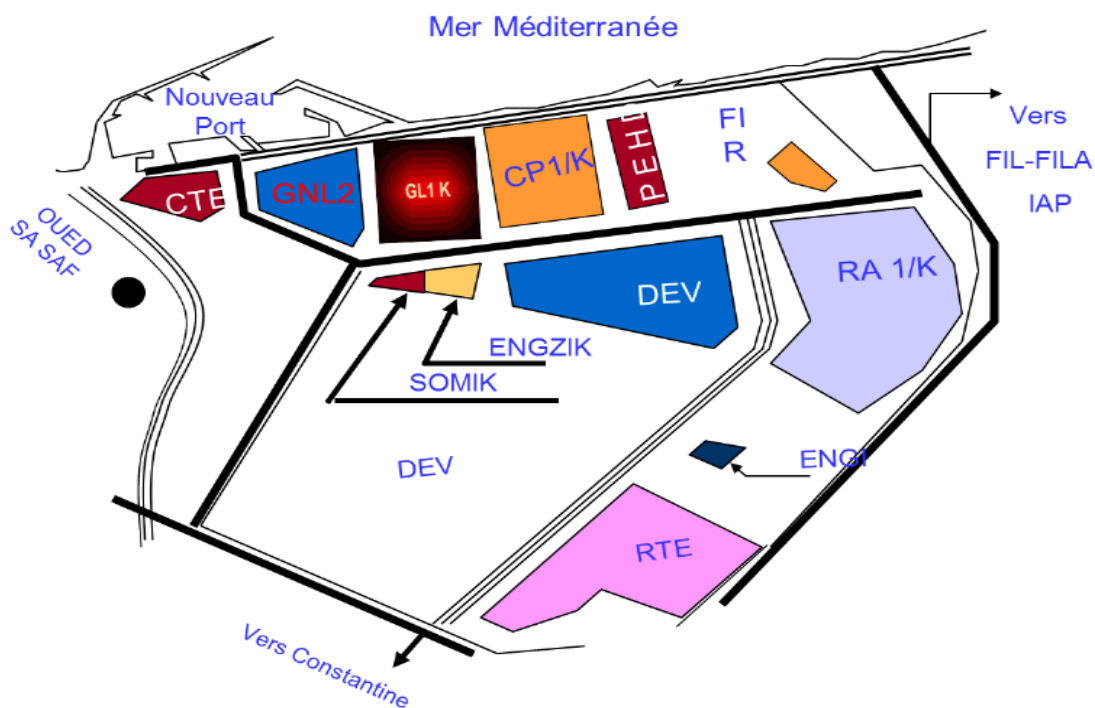
Annexe

Le planning de réalisation de GLK est le suivant :

- 1965 à 1967, l'étude du projet.
- Décembre 1967 appel d'offre.
- Mars 1969 démarrage des travaux.
- Décembre 1972 la mise en service de l'usine, les trois premières unités : 10 - 20 - 30 ont été construites par la société Française " TECHNIP ".
- La production des 03 unités a commencé en Novembre 1972, leur capacité totale est d'environ 1950 mètres cubes par jour du GNL.

2. Situation et objectif du complexe GL1K

Le complexe de liquéfaction du gaz naturel GL1K de SKIKDA est situé à l'est de la ville s'étalant sur une superficie de 90 hectares, l'usine est alimentée en gaz naturel (GN) à partir du gisement de HASSI R'MEL par un gazoduc d'une longueur de 580 km et d'un diamètre de 40 pouces



Situation du complexe GL1K dans la zone industrielle de Skikda.

Le complexe GL1/K a été conçu pour le traitement et la liquéfaction du GN. Cette dernière permet la réduction d'environ 600 fois son volume initial pour faciliter son stockage et son transport par méthaniers vers l'Europe le Japon et les Etats-Unis, etc. Il a une capacité annuelle de production de 6.942 millions de m³ de GNL, et une capacité de stockage de 308000 m³.

➤ **Capacités**

• **Capacités de production**

Le complexe GL1/K traite actuellement 5.7 milliards m³ de GN par an, dont les produits dérivés sont : Gaz Naturel Liquéfié (GNL), Ethane, Propane, Butane, Isobutane, Gazoline et dont les capacités contractuelle installés (CCI) de production sont :

- GNL : 6 942 000 m³/an
- Ethane : 170 000 Tonnes /an
- Propane : 108 400 Tonnes /an
- Butane : 92 600 Tonnes /an
- Isobutane : 2 600 Tonnes /an
- Gazoline : 60 250 Tonnes /an

• **Capacités de stockage de produits**

L'unité de stockage de GNL comprend 05 réservoirs dont trois (03) de 56 000 m³ et deux (02) de 70 000 m³, soit une capacité totale de 308 000 m³ tandis que le stockage des GPL se fait dans deux (02) bacs de propane de 12 500 Tonne chacun et un bac de butane de 20 000 Tonnes. Deux (02) bacs de Gazoline de 20 000 Tonnes.

Les bacs 81TK 01-A et 81TK 01-B ont une capacité de 56000 m³ chacun. Les deux bacs vont être remplacés par deux (02) nouveaux semis enterrés de 150000 m³ chacun pour le projet du « MEGATRAN ».