

Modélisation micro-échelle de la qualité de l'air en milieu urbain par méthodes CFD et IA

Micro-scale modeling of air quality in urban areas using CFD and AI methods

■ N. REIMINGER^{1,2*}, X. JURADO¹

¹ AIR&D – Strasbourg

² Laboratoire ICUBE – UMR 7357 – Illkirch-Graffenstaden

Mots-clés :

Qualité de l'air
Dioxyde d'azote
Milieu urbain
Mécanique des fluides numérique
Intelligence artificielle

RÉSUMÉ

La pollution atmosphérique est une problématique majeure, autant à l'échelle nationale qu'internationale, car elle est à l'origine de nombreuses maladies et d'un très grand nombre de décès prématurés chaque année. En ville, la qualité de l'air est d'autant plus dégradée que les sources anthropogéniques de polluants de l'air sont nombreuses, comme pour le dioxyde d'azote (NO₂) majoritairement issu du trafic routier. Afin de se protéger contre cette pollution ainsi que pour prendre les bonnes décisions en matière d'urbanisme durable, un des enjeux est d'être en mesure d'évaluer les concentrations en polluants de l'air de manière fiable, précise, en tout point et à toute altitude. La modélisation numérique micro-échelle apparaît comme un outil adapté pour répondre à cet enjeu, tenant compte à la fois de la météorologie, mais aussi de la configuration du bâti, mais son opérationnalité nécessite d'être prouvée sur le terrain et dans un contexte réel. La présente étude a été réalisée dans ce but, où deux modèles micro-échelle de qualité de l'air incluant un modèle de mécanique des fluides numérique (CFD, terme anglais pour *Computational Fluid Dynamics*) ainsi qu'un modèle d'intelligence artificielle (IA) ont été testés et comparés à des mesures horaires et mensuelles de concentration en NO₂ relevées à Anvers en Belgique. Les résultats montrent que les deux modèles sont valides, satisfaisant tous deux largement les critères d'erreur tolérée par la directive cadre européenne relative à la qualité de l'air, tant pour la modélisation horaire des concentrations en NO₂ (avec un avantage pour la méthode d'IA) que pour la modélisation mensuelle de ces concentrations (avec un avantage pour la méthode CFD). Cette étude montre la précision et la fiabilité de tels modèles dans un contexte appliqué d'étude de la qualité de l'air, prouvant leur intérêt dans le cadre d'études environnementales afin de développer un urbanisme durable et concerté.

Keywords:

Air quality
Nitrogen dioxide
Urban environment
Computational fluid mechanics
Artificial intelligence

ABSTRACT

Air pollution is a major issue, both at national and international level, as it is the cause of numerous illnesses and many premature deaths every year. In cities, air quality is particularly poor because of the numerous anthropogenic sources of air pollutants, such as nitrogen dioxide (NO₂) which is mainly due to road traffic emissions. To protect people against this pollution, and to make the right decisions in terms of sustainable urban planning, one of the challenges is to be able to assess air pollutant concentrations reliably and accurately, at any point and at any altitude. Micro-scale numerical modeling appears to be a suitable tool to address this issue, considering both meteorology and building configuration, but its applicability in real context needs to be proven. The present study was carried out to this end, where two micro-scale air quality models including a Computational Fluid Dynamics (CFD) model and an Artificial Intelligence (AI) model were used, and their results compared against hourly and monthly NO₂ concentration observed in Antwerp, Belgium. The results show that both models are sound, largely satisfying the error tolerance criteria of the European Air Quality Directive, both for hourly modeling of NO₂ concentrations (with an advantage for the AI method) and for monthly modeling of these concentrations (with an advantage for the CFD method). This study demonstrates the accuracy and reliability of such models in an applied air quality study context, proving their value in environmental studies with the aim of developing sustainable and concerted urban planning.

Introduction

La pollution atmosphérique représente l'une des préoccupations majeures de ces dernières décennies, notamment à cause de ses effets néfastes sur la santé, pouvant à la fois se traduire par une baisse du bien-être et de la qualité de vie des citoyens, mais aussi de

l'espérance de vie de l'ordre de plusieurs années [MANISALIDIS *et al.*, 2020]. En 2016, à l'échelle mondiale, on estimait à approximativement 4,2 millions le nombre de décès prématurés par an du seul fait de la pollution de l'air extérieur [WHO, 2016]. À l'échelle du continent européen, ce nombre s'élevait la même année à 500 000 décès prématurés [EEA, 2019]. En France, enfin, 40 000 décès prématurés par an ont été estimés au cours des

* Auteur correspondant – Courriel : nreiminger@air-d.fr

dernières années du fait des particules fines de type PM_{2,5} et 7 000 du fait du dioxyde d'azote (NO₂) [SANTÉ PUBLIQUE FRANCE, 2021]. En addition, la santé des citoyens est d'autant plus précaire que ces derniers vivent à proximité d'axes routiers à fort trafic, notamment en milieu urbain [CHEN *et al.*, 2017]. Sachant que plus de trois personnes sur cinq en Europe vivent en ville, et que ce nombre augmente continuellement [UNITED NATIONS, 2019], la pollution de l'air extérieur représente donc un véritable défi pour notre société moderne [AGATHOKLEOUS et SICARD, 2021].

Parmi les polluants les plus fréquemment rencontrés en milieu urbain, le dioxyde d'azote (NO₂) a été listé parmi les polluants d'importance majeure par l'Organisation mondiale de la santé [WHO, 2005], du fait de ses effets à la fois néfastes sur la santé [WU *et al.*, 2022; YUE *et al.*, 2022], mais aussi sur l'environnement et les cultures [SUDALMA *et al.*, 2015]. Ce polluant, fréquemment rencontré en milieu urbain, est majoritairement originaire de sources anthropiques telles que les émissions issues du trafic routier, et, en moindre mesure, des activités industrielles et résidentielles [THUNIS, 2018]. À titre d'exemple, en Île-de-France, plus de la moitié (56 %) des émissions en oxydes d'azote (incluant le dioxyde d'azote) provient du secteur du transport routier, lorsque 20 % de ces émissions proviennent des secteurs tertiaires et résidentiels [AIRPARIF, 2016].

Afin de faire face à cette problématique de pollution de l'air en ville, l'Union européenne (UE) ainsi que l'Organisation mondiale de la santé (OMS) ont respectivement établi des valeurs limites réglementaires ainsi que des valeurs guides de concentration pour différents polluants atmosphériques, dont le dioxyde d'azote, visant à limiter leur impact sur la santé des populations [EU, 2008; WHO, 2021]. Pour pouvoir utiliser ces valeurs de référence, qui peuvent aussi bien être horaires que journalières, ou encore annuelles, il est cependant nécessaire d'être en mesure d'évaluer de façon fiable et précise les concentrations observées sur le terrain, et ce, pour les différents pas de temps concernés. Pour cela, deux façons de procéder coexistent : la première, en suivant les concentrations des différents polluants par l'intermédiaire de capteurs de qualité de l'air et, la seconde, en estimant ces concentrations par l'intermédiaire de la modélisation numérique. Alors que la première méthode permet de rendre compte de concentrations en polluants réellement observés sur site, elle souffre également de limitations pratiques quant aux résultats obtenus, tant sur l'aspect spatial (une mesure ne vaut que pour l'endroit où elle est prise) que sur l'aspect temporel (par ex. un an de mesure est nécessaire pour

pouvoir comparer les résultats aux valeurs annuelles UE et OMS) [MICHELOT *et al.*, 2015]. Cette méthode peut donc se révéler très coûteuse, en temps et en argent, selon le besoin identifié [JURADO *et al.*, 2023]. L'utilisation de la modélisation numérique revêt alors un intérêt particulier, car elle permet de s'affranchir de ces problématiques spatiale et temporelle, en fournissant des données en tout point de l'espace et en permettant de jouer divers scénarios (climatiques, météorologiques, de trafic, etc.). Elle nécessite toutefois un usage expert, notamment quant au type de modèle à adopter selon la situation rencontrée, ainsi que des validations préalables basées sur des données mesurées [JOURDAIN, 2007].

Parmi les différentes approches usuelles de modélisation numérique de la qualité de l'air, telles que les approches gaussiennes, lagrangiennes ou encore de chimie-transport, les modèles de mécanique des fluides numérique (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) ont montré un grand intérêt au cours des dernières décennies pour l'étude de la dispersion des polluants de l'air en milieu urbain [BLOCKEN, 2014; PANTUSHEVA *et al.*, 2022]. En effet, ce type de modèle est particulièrement adapté à l'échelle urbaine, car il permet de rendre compte de l'effet de la forme des bâtiments [XIE *et al.*, 2006], de la configuration des rues canyon [LI *et al.*, 2020] ou encore des effets induits par des structures de génie civil telles que les murs antibruit [REIMINGER *et al.*, 2020a] sur les modifications de l'écoulement de l'air, et, donc, sur la dispersion des polluants atmosphériques en milieu urbain. Pour donner une illustration de ces propos sur le territoire national français, les modèles de type CFD ont, par exemple, été récemment utilisés pour caractériser l'impact odorant d'une installation industrielle [BROCHETON et BARA, 2023], la problématique des odeurs étant conjointe avec celle de la pollution de l'air [JAUBERT, 2022]. Toutefois, ces modèles, le plus souvent validés en conditions contrôlées au laboratoire grâce à des expériences réalisées en soufflerie, souffrent également de certains inconvénients tels qu'un manque global de validation opérationnelle sur le terrain et en conditions réelles [PANTUSHEVA *et al.*, 2022]. En outre, du fait de la complexité des calculs résolus par les modèles CFD, l'utilisation de ces derniers n'est viable que pour modéliser de petites zones urbaines (petits quartiers, jusqu'à une superficie de 1 km²), car ils deviennent rapidement trop gourmands en matière de ressources de calcul pour pouvoir être utilisés à plus grande échelle de manière pertinente, comme à l'échelle de la ville. Enfin, les temps de calcul nécessaires à l'obtention des résultats

ne les rendent pas non plus aptes à la modélisation en temps réel ou quasi-temps réel, ou à une utilisation efficace pour l'évaluation de nombreux scénarios dans un but d'aide à la décision sur des zones urbaines vastes. Pour pallier ce problème, de récents travaux datant de 2022 ont été menés afin d'entraîner un algorithme d'intelligence artificielle (IA) visant à atteindre la précision des modèles CFD tout en permettant de couvrir une plus grande zone spatiale et en garantissant des temps de calcul courts (100 à 1 000 fois supérieurs aux temps de calcul CFD pour une zone équivalente) dans le but d'obtenir des résultats quasi-temps réel et de servir comme outil d'évaluation de scénarios et d'aide à la décision [JURADO *et al.*, 2022]. Cet algorithme, capable de reproduire les résultats issus du modèle CFD qui a permis son entraînement, n'a cependant pas encore été comparé dans le même temps à des données mesurées sur le terrain ainsi qu'au modèle CFD utilisé dans ce même contexte opérationnel.

L'objectif de cette étude est de réaliser la toute première comparaison conjointe entre modèle de mécanique des fluides numérique (CFD), modèle d'intelligence artificielle (IA) et concentrations en polluants atmosphériques mesurées sur le terrain afin de qualifier la validité opérationnelle de ces deux types de modèles. En particulier, il s'agit de comparer les résultats de dispersion des polluants de l'air issus de ces modèles contre des concentrations en dioxyde d'azote (NO_2) mesurées sur une journée (concentrations horaires) ainsi que sur un mois (concentrations mensuelles) au niveau d'une partie de la ville d'Anvers en Belgique afin d'évaluer les apports et les faiblesses des deux approches dans un contexte appliqué d'ingénierie. Les détails concernant la zone d'étude, les données à disposition et les modèles utilisés sont fournis en *Section 1*. Les résultats de l'étude et leur discussion sont quant à eux exposés en *Section 2*.

1. Matériels et méthodes

1.1. Site d'étude et données disponibles

Le site d'étude retenu dans le cadre de ces travaux correspond à la zone urbaine située dans le centre-ville d'Anvers en Belgique. Au cours de l'année 2016, l'agence flamande pour l'environnement (VMM, Vlaamse Milieu-maatschappij) ainsi que l'Université d'Anvers ont conduit une campagne de mesure de la qualité de l'air à Anvers dans le cadre du projet scientifique *Curieuze-Neuzen*. Durant cette campagne, qui s'est déroulée du 30 avril 2016 au 28 mai 2016, près de 2 000 échantillonneurs passifs de dioxyde d'azote (NO_2) ont été installés sur toute la ville. Une partie des résultats de cette

campagne de mesure a été partagée aux membres du forum Fairmode (Forum for air quality modeling), un consortium créé en 2007 par l'Agence européenne pour l'environnement (EEA, European Environment Agency) ainsi que le Centre commun de recherche (JRC, Joint Research Center) et ayant pour objectif de soutenir l'utilisation harmonisée des modèles par les États membres de l'Union européenne, tout en mettant l'accent sur l'application des modèles dans le cadre des directives européennes sur la qualité de l'air.

Toutes les données d'entrée nécessaires à la réalisation des modélisations numériques et dont les détails sont fournis ci-après ont été mises à disposition par le forum Fairmode et n'ont pas subi de traitement additionnel.

1.1.1. Données 3D des bâtiments

La zone où les données de concentration mesurées en NO_2 sont disponibles correspond à une zone urbaine de $800 \times 800 \text{ m}^2$ typique des villes de l'Europe de l'Ouest, incluant à la fois des rues canyons ainsi que des lieux plus ouverts. La majorité des bâtiments correspondent à des résidences de deux à trois étages incluant de petits jardins privés en arrière-cour. Plusieurs commerces sont également présents, notamment le long de la N184, l'axe routier principal au niveau de cette zone et qui la traverse d'est en ouest. Un fichier cadastral 3D LOD I (*level of detail 1*) disponible dans les bases de données cartographiques flamandes (GRB, Groot-schalig Referentiebestand), et incluant également les données de hauteur des bâtiments, a été utilisé afin de construire les différents modèles numériques 3D de cette étude.

1.1.2. Concentrations mesurées en dioxyde d'azote (NO_2)

Une photographie satellite de la zone d'étude est donnée en *figure 1*. Cette figure présente également la localisation des 28 échantillonneurs passifs de NO_2 qui furent installés dans cette zone, durant la campagne de mesure de mai 2016, et à proximité d'axes routiers dont le trafic est connu (ronds jaunes). La mesure de la concentration en NO_2 à l'aide d'échantillonneurs passifs se base sur le principe de diffusion du dioxyde d'azote sur un support absorbant pendant toute la durée de la campagne de mesure. Ce support est ensuite analysé en laboratoire pour conduire à une concentration moyenne en NO_2 sur la période de la campagne (dans le cas présent, une concentration moyenne mensuelle). La collecte, la validation et le contrôle de qualité de l'échantillonnage ont été effectués selon la procédure décrite par DE CRAEMER *et al.* [2020], résultant en un écart maximal réel des échantillonneurs passifs inférieur



Figure 1. Photographie satellite de la zone d'étude (Géoportail) précisant la localisation des échantillonneurs passifs de NO₂ (ronds jaunes) ainsi que la station de mesure automatisée de qualité de l'air (rond rouge) de l'agence flamande pour l'environnement

à 10 %, ce qui est conforme à la réglementation européenne en la matière (objectif d'incertitude : < 15 % pour des stations fixes et < 25 % pour des mesures indicatives) [EU, 2008].

En plus de ces données de concentrations mensuelles, une station de suivi automatisée de la qualité de l'air opérée par la VMM est également présente dans la zone. Il s'agit entre autres d'une station urbaine de typologie « trafic » donnant directement sur la N184 (située à 7 m de cet axe routier). La localisation de cette station est également précisée en *figure 1* (rond rouge). Les données mises à disposition au niveau de cette station correspondent à une concentration moyenne sur la période de la campagne de mesure du 30 avril 2016 au 28 mai 2016, ainsi que des données horaires pour la journée du 6 mai 2016.

1.1.3. Fond de pollution

Le fond de pollution en NO₂ nécessaire à la prise en compte des sources de pollution externes au modèle numérique fut déterminé par l'institut flamand de recherche technologique (VITO, Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek) au pas de temps horaire. Ce dernier a été calculé à l'aide du modèle RIO [JANSSEN *et al.*, 2008], un modèle d'interpolation élaboré pour évaluer le fond de pollution sur la base des concentrations observées par un réseau automatisé de mesure. À titre informatif, la concentration de fond moyenne en NO₂ estimée durant la campagne de mesure de mai 2016 était de 27,6 µg/m³.

1.1.4. Données météorologiques

Les données météorologiques utilisées sont issues des mesures réalisées au niveau de la station M802 Anvers-

Luchtbal (localisation : 51.261, 4.425) située 5 km au nord de la zone d'étude. Ces données, également disponibles au pas de temps horaire et pour toute l'année 2016, incluent notamment vitesse et direction de vent, température, humidité relative et radiations solaires. La rose des vents moyenne observée durant la campagne de mesure de mai 2016 est donnée en *figure 2*. Cette figure montre notamment une distribution plutôt homogène des vitesses de vent au sein des gammes considérées, allant de 0 à 8 m/s par pas de 1 m/s, ainsi qu'une dominance de vents provenant du nord-ouest.

1.1.5. Données d'émissions

Enfin, les données horaires d'émissions issues du trafic routier ont été fournies par le département flamand de la mobilité. Ils correspondent à des résultats issus du modèle officiel flamand d'émissions liées au trafic (Fastrace version 2.1) qui utilise les facteurs d'émissions issus de la base de données Copert 5, ainsi que les flux de trafic enregistrés et modélisés par l'agence au cours de l'année 2016. Le calcul de ces émissions tient compte du type de route (urbaine, rurale ou autoroute), de la vitesse de circulation ainsi que du type de véhicule (véhicule léger, véhicule lourd, bus, etc.).

1.2. Modèle de mécanique des fluides numérique (CFD)

Les simulations CFD ont été réalisées à l'aide d'OpenFOAM 9.0 sur une station de calcul fonctionnant sous Ubuntu 20.04.6 LTS avec un processeur Intel Xeon Silver 4216 2.10 GHz muni de 32 cœurs de calcul CPU et d'une carte graphique Nvidia Quadro P400.

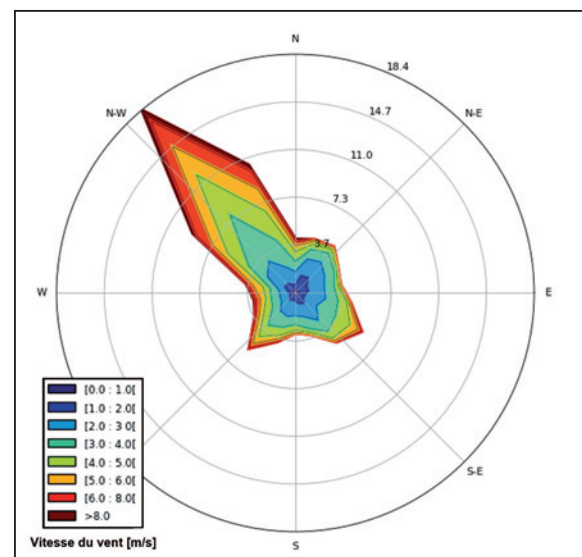


Figure 2. Rose des vents moyennée sur la période de la campagne de mesure mensuelle (provenance des vents : N = vent provenant du Nord et allant vers le Sud) suivant huit classes de vitesses en m/s relevées à 30 m de hauteur

Le solveur de calcul utilisé dans le cadre de cette étude est le solveur *pimpleFoam*, un solveur de base d'OpenFOAM modifié afin de modéliser la dispersion de la pollution de l'air. Ce solveur résout les équations incompressibles de Navier-Stokes pour des écoulements transitoires à l'aide de la méthode de moyenne de Reynolds (RANS, *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). L'utilisation d'une méthode de type RANS entraîne l'apparition d'un nouveau terme dans l'équation du moment, le tenseur des contraintes de Reynolds, qui nécessite alors le choix d'un modèle de fermeture des flux turbulents. Le modèle utilisé dans le cadre de cette étude est le modèle k-epsilon proposé par YAKHOT *et al.* [1992].

Le solveur de calcul, l'utilisation d'une méthode RANS ainsi que du modèle de turbulence k-epsilon appliqué à l'étude de la dispersion de polluants de l'air ont été validés dans le cadre de travaux antérieurs, tant sur les champs de vitesses que sur les concentrations en polluants modélisées, sur la base de résultats expérimentaux obtenus en soufflerie [REIMINGER *et al.*, 2020c]. Tous les détails, incluant également les équations résolues, pourront être retrouvés dans ces travaux.

Les modélisations ont été réalisées en trois dimensions sur la base des données de configuration des routes et des bâtiments disponibles pour Anvers (voir section précédente). Un aperçu du modèle numérique 3D obtenu est proposé en *figure 3*.

Le maillage utilisé pour cette étude correspond à des mailles cubiques d'arêtes 1 m à proximité du sol et des murs des bâtiments, un maillage relativement fin pour ce type de modélisation et d'échelle [VRANCKX *et al.*, 2015; SANCHEZ *et al.*, 2017]. Un raffinement supplémentaire à 0,5 m a été employé à proximité des routes (représentant les sources de pollution dans le modèle).

En outre, toutes les recommandations formulées par FRANKE *et al.* [2007] concernant les conditions aux limites et les dimensions du domaine de calcul ont été respectées (distances minimales de $5 \times H_{max}$ entre les parois du domaine et les bâtiments les plus proches, avec H_{max} la hauteur du bâtiment le plus haut). Ces différentes conditions ont entraîné des domaines de calcul comprenant en moyenne 17 millions de mailles.

Les émissions issues du trafic routier ont été modélisées en considérant une source volumique de polluants le long des routes, sur toute leur largeur et sur la hauteur d'une maille (0,5 m) en tenant compte des émissions distinctes au niveau de chaque segment de route à disposition.

Les simulations ont été réalisées à l'aide de schémas du second ordre pour tous les termes divergents, gradients et laplaciens, et ont été exécutées jusqu'à convergence totale, conduisant à des résidus inférieurs à 10^{-5} .

Un total de 18 directions de vent allant de 0°N à 340°N et selon un pas de 20° a été modélisé en considérant une vitesse de vent en entrée du domaine suivant un profil logarithmique comme préconisé par RICHARDS et NORRIS [2011]. Sur la base des résultats obtenus, les concentrations moyennes horaires et mensuelles ont été déterminées conformément aux méthodes données par REIMINGER *et al.* [2020b].

Les émissions issues du trafic routier étant sous forme de NO_x (incluant NO_2 et NO notamment), les concentrations en NO_2 ont été calculées en post-traitement sur la base des concentrations modélisées en NO_x à l'aide de l'équation 1 [BÄCHLIN *et al.*, 2008], cette méthode ayant fait ses preuves pour déterminer de manière rapide et efficace les concentrations en NO_2 sur la base de concentrations modélisées en NO_x [REIMINGER *et al.*, 2024].

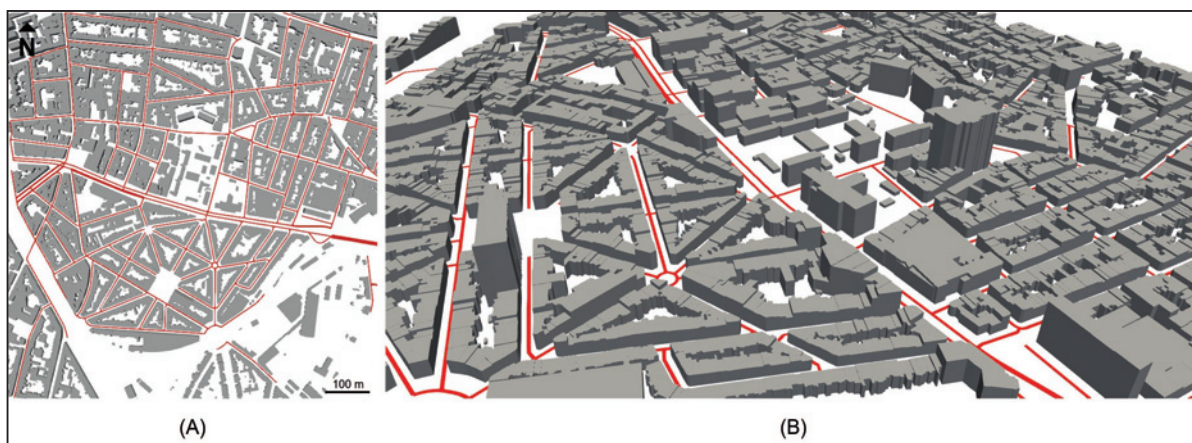


Figure 3. Illustration de la géométrie 3D du domaine de calcul en (A) vue de dessus et (B) vue de trois-quarts

$$[NO_2] = \frac{29 \cdot [NO_x]}{[NO_x] + 35} + 0,217 [NO_x] \quad \text{[équation 1]}$$

avec $[NO_x]$ et $[NO_2]$ les concentrations respectives en oxydes et dioxyde d'azote $[g/m^3]$.

Enfin, les résultats obtenus étant des concentrations horaires en NO_2 , les concentrations moyennes sur la période du 30 avril au 28 mai 2016 ont été calculées selon l'équation 2.

$$\overline{[NO_2]} = \frac{1}{n} \sum_{h=1}^n [NO_2]_{mod,h} + \frac{1}{n} \sum_{h=1}^n [NO_2]_{bg,h} \quad \text{[équation 2]}$$

avec $\overline{[NO_2]}$ la concentration moyenne en NO_2 $[g/m^3]$, $[NO_2]_{mod,h}$ la concentration horaire modélisée en NO_2 $[g/m^3]$ et $[NO_2]_{bg,h}$ la concentration horaire du fond de pollution en NO_2 $[g/m^3]$.

1.3. Modèle d'intelligence artificielle (IA)

Les simulations IA ont été réalisées sur une station de calcul fonctionnant sous Ubuntu 20.04.1 LTS avec un processeur Intel Xeon Gold 6126 2.60 GHz muni de 24 cœurs de calcul CPU et d'une carte graphique Nvidia GeForce GTX 1080 Ti.

Le modèle d'intelligence artificielle employé dans le cadre de cette étude correspond à un modèle par apprentissage supervisé utilisant un réseau de neurones convolutif (CNN, *Convolutional Neural Network*) de type encodeur-décodeur. Plus particulièrement, il s'agit d'un algorithme de type *multiResUnet* [IBTEHAZ et RAHMAN, 2020]. Ce modèle d'IA permet notamment de produire des cartes de concentration en polluants atmosphériques à plusieurs hauteurs (de 1,5 m à 15 m selon un pas de 1,5 m) sur la base des hauteurs des bâtiments et de leur emprise surfacique, ainsi que d'une cartographie des sources de polluants routiers et des informations météorologiques.

Ce modèle d'IA a été créé et entraîné dans le cadre de travaux antérieurs sur la base de 4097 exemples de résultats CFD de dispersion de la pollution de l'air en milieu urbain obtenus à l'aide du solveur de calcul décrit en section précédente (calage du modèle), et a été testé sur 822 résultats supplémentaires n'ayant jamais servi à son entraînement (validation du modèle). Le cas d'Anvers investigué dans le présent travail n'a jamais servi à l'entraînement du modèle ou encore à sa validation. Comparativement aux résultats du modèle CFD ayant permis son entraînement, le modèle IA procure des résultats 100 à 1000 fois plus rapidement tout en satisfaisant les critères de performances des modèles numériques de qualité de l'air fournis par CHANG et HANNA [2004] ($FAC2 = 0,8$ et $R = 0,8$). Tous les détails concernant ce modèle (architecture, profondeur, fonction de

perte, choix des hyperparamètres, etc.) ainsi que les résultats détaillés de validation sont fournis par JURADO et al. [2022].

Il est important de souligner la différence fondamentale entre l'approche de modélisation par IA et celle par CFD. Alors que la modélisation CFD réside sur le principe de la résolution des équations de Navier-Stokes (modèle basé sur la physique), le modèle par IA employé ici réside uniquement sur le principe de la compréhension du lien entre données d'entrée (données météorologiques, émissions, etc.) et de sortie (concentrations en polluants de l'air) sans qu'aucune équation de physique ne soit résolue (modèle basé sur la donnée).

Dans le cadre de la présente étude, et contrairement au modèle CFD, chaque condition météorologique (direction et vitesse de vent) a été modélisée, ce qui a entraîné un total de 8 783 cartes de pollution horaire en NO_x . Cela était notamment possible grâce à la très grande rapidité de calcul du modèle IA par rapport à son homologue CFD. Comme précédemment, les cartes de concentrations horaires en NO_2 ont également été déterminées à l'aide de l'équation 1 et les concentrations moyennes mensuelles ont été obtenues en suivant l'équation 2.

1.4. Critères de performance

Divers critères de performances ont été considérés dans le cadre de ce travail afin d'évaluer les performances respectives des modèles CFD et IA et de les comparer aux concentrations mesurées sur site. En particulier, les critères suivants, fournis par CHANG et HANNA [2004] et THUNIS et al. [2012], ont été utilisés : *FAC2*, *R*, *NSD*, *MFE*, *NMSE*, *MRE* et *Target*. Les équations de ces indicateurs de performances sont données en Annexe A.

2. Résultats et discussion

2.1. Modélisation des concentrations horaires en NO_2

La première partie de l'étude visait à comparer les concentrations horaires en NO_2 modélisées par les modèles CFD et IA avec les concentrations horaires en NO_2 disponibles à Anvers. Ces résultats de comparaison sont donnés en figure 4.

En premier lieu, d'un point de vue macroscopique, on peut observer que les deux modèles suivent globalement bien les tendances d'évolution des concentrations en dioxyde d'azote observées au niveau de la station de mesure. En effet, on observe pour les deux modèles une augmentation des concentrations en début de journée avec un pic aux alentours des 5 h, puis une baisse des

concentrations pour atteindre un plateau entre 10 h et 18 h. Enfin, une nouvelle augmentation des concentrations apparaît à partir de 19 h entraînant un second pic qui disparaît à son tour en fin de soirée.

Si l'on s'intéresse aux résultats plus en détail, on observe néanmoins une certaine disparité entre le modèle CFD et le modèle d'IA. Entre 1 h et 7 h du matin, les deux modèles produisent des résultats fidèles à la tendance observée, mais le modèle CFD procure de meilleurs résultats, quasi parfaitement en phase avec les concentrations observées réellement, exception faite de 1 h du matin. Sur cette période, les concentrations obtenues par l'algorithme d'IA sont globalement 20 % inférieures à celles issues du modèle CFD. À partir de 7 h et jusqu'à 18 h, la tendance s'inverse, et c'est le modèle d'IA qui procure les meilleurs résultats. Sur cette période, le modèle CFD sous-estime quant à lui les concentrations en dioxyde d'azote de près d'un facteur deux. Enfin, à partir du 19 h, les deux modèles donnent globalement les mêmes résultats avec une avance d'une heure sur le pic de concentration réellement observé et une sous-estimation de ce pic d'un facteur deux en fin de soirée. Cette sous-estimation pourrait être liée aux inversions thermiques généralement observées au sein de l'atmosphère en fin de soirée, lorsque le soleil se couche, puis en début de nuit. Dans ces cas-là, la stabilité atmos-

phérique passe généralement d'un état dit « instable » (apport de turbulence thermique additionnel à la turbulence mécanique entraînant le plus souvent une dilution de la pollution de l'air) vers un état dit « stable » (atmosphère stratifiée ayant tendance à faire stagner les polluants). Comme le modèle CFD utilisé ici est un modèle isotherme, tout comme le modèle d'IA par voie de conséquence, cette sous-estimation pourrait s'expliquer par la non-prise en compte de ce passage vers une atmosphère stable sur la fin de la journée. On notera toutefois que cette explication phénoménologique reste une hypothèse.

Ainsi, d'un point de vue qualitatif, les deux modèles reproduisent globalement bien l'évolution de la concentration en dioxyde d'azote sur la journée du 6 mai 2016, avec tout de même un avantage pour le modèle d'intelligence artificielle. Afin de vérifier cela, ces derniers ont également été comparés quantitativement en calculant les critères de performances spécifiés en Section 1.4. Les résultats obtenus sont donnés dans le *tableau I*.

D'après les résultats présentés dans ce tableau, les deux modèles valident presque tous les objectifs de performances usuels des modèles de qualité de l'air ($FAC2 > 0,5$, $NMSE < 1,5$, $MRE < 0,5$ et $R > 0,65$), à l'exception du critère *Target* pour le modèle CFD dont l'objectif de 0,8 est très légèrement dépassé (0,83). En comparant les modèles deux à deux, tous les critères à l'exception

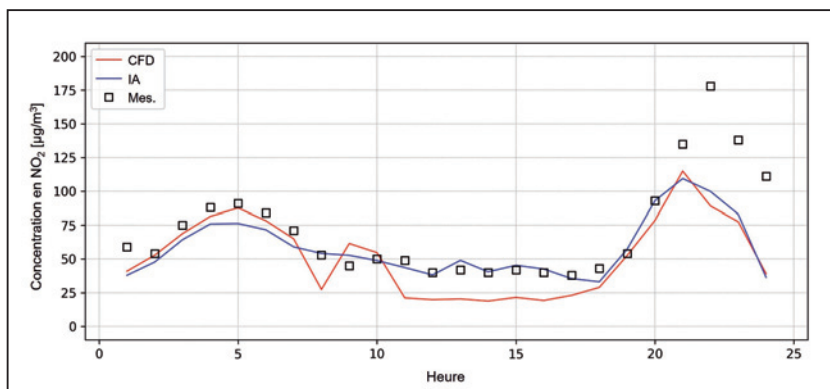


Figure 4. Comparaison entre concentrations horaires mesurées (Mes.) et concentrations horaires modélisées (CFD et IA) pour le dioxyde d'azote NO_2 durant la journée du 6 mai 2016

Modèle	FAC2	MFE	NMSE	MRE	R	NSD	Target
CFD	1,00	0,39	0,25	0,31	0,77	0,76	0,83
IA	1,00	0,20	0,17	0,17	0,81	0,58	0,73
Objectif	> 0,5*	–	< 1,5*	< 0,5***	> 0,65**	–	< 0,80**
Valeur parfaite	1	0	0	0	1	1	0

*D'après CHANG et HANNA [2005], **d'après THUNIS *et al.* [2012], ***d'après EU [2008] pour la modélisation horaire des concentrations en NO_2 .

Tableau I. Comparaison entre modèles CFD et IA sur les résultats de concentrations horaires en dioxyde d'azote NO_2 pour les différents critères de performances considérés

du NSD sont en la faveur du modèle d'intelligence artificielle par rapport au modèle CFD, ce qui confirme les observations qualitatives précédentes. Enfin, il est également important de noter que les écarts relatifs par rapport aux mesures (MRE) obtenus pour les deux modèles (17 % pour le modèle d'IA et 31 % pour le modèle de CFD) respectent l'objectif de 50 % fixé par la directive cadre européenne pour la modélisation horaire des concentrations en dioxyde d'azote.

Ainsi, compte tenu des résultats précédents, les modèles de CFD et d'IA sont tous deux en mesure d'évaluer les concentrations horaires en dioxyde d'azote en milieu urbain, conformément aux objectifs de la directive européenne relative à la qualité de l'air ainsi qu'aux objectifs de performance des modèles de dispersion de la pollution atmosphérique. Le modèle d'IA a cependant beaucoup mieux performé dans cet exercice, notamment avec une erreur presque deux fois plus faible par rapport au modèle CFD et pour des temps de calcul jusqu'à 1000 fois plus rapides. On rappellera toutefois que ces erreurs ne sont pas uniquement dues aux modèles ainsi qu'à leurs hypothèses de calcul intrinsèques, mais que beaucoup d'autres sources d'incertitudes existent en amont de la modélisation, notamment au niveau du calcul des émissions (source majeure d'incertitudes dans les données d'entrée) ou encore des données météorologiques.

Enfin, il est également important de garder à l'esprit les limites de cette comparaison. En effet, seule une journée de données expérimentales horaires était à disposition et les résultats obtenus ne sont représentatifs que de cette journée. Rien ne permet de dire que cette journée est statistiquement représentative des autres jours de l'année. Ainsi, il est donc possible que les résultats obtenus évoluent dans le cas où l'on aurait à disposition davantage de données, modifiant de ce fait les observations précédentes. Quoiqu'il en soit, les présents résultats sont très prometteurs, et de bon augure pour mener à bien davantage de travaux de comparaison en ce sens.

2.2. Modélisation des concentrations mensuelles en NO₂

La seconde partie de l'étude visait à comparer les concentrations mensuelles en NO₂ modélisées par les modèles CFD et IA avec les concentrations en NO₂ mesurées mensuellement à Anvers. On rappellera au passage que les concentrations mensuelles obtenues par modélisation sont le fruit de la concaténation de modélisations horaires (voir Section 1.2 et 1.3). Comme précédemment, les indices de performance usuels pour qualifier la qualité des modèles de qualité de l'air ont été calculés et les résultats sont donnés dans le *tableau II*.

Une nouvelle fois, les deux modèles valident presque tous les objectifs de performances des modèles de qualité de l'air à l'exception du *Target* qui est, cette fois-ci, en la défaveur du modèle d'IA. Par rapport aux modélisations horaires de la journée du 6 mai 2016 discutées en section précédente, presque tous les indicateurs se sont améliorés. L'écart relatif (MRE) obtenu par le modèle d'IA est quant à lui resté stable (18 % contre 17 % précédemment), contrairement à l'écart relatif obtenu par le modèle CFD qui s'est très nettement amélioré (13 % contre 31 % précédemment). Deux hypothèses peuvent expliquer cette amélioration : soit les concentrations horaires de la journée du 6 mai 2016 étaient trop difficiles à évaluer par le modèle CFD et ce modèle s'en serait bien sorti sur d'autres journées, soit ce dernier est beaucoup plus performant pour produire des moyennes de concentration plutôt que des concentrations quasi-temps réel. Enfin, on notera également que les incertitudes de ces deux modèles sont à nouveau conformes aux objectifs de la directive européenne relative à la qualité de l'air (< 30 %) ici plus stricte que pour les concentrations moyennes horaires (la valeur de 30 % prise ici correspond à l'objectif en concentration annuelle, plus strict que l'objectif pour les concentrations horaires, car il n'existe pas d'objectifs en matière de concentration mensuelle).

Modèle	FAC2	MFE	NMSE	MRE	R	NSD	Target
CFD	1,00	0,14	0,02	0,13	0,76	0,89	0,68
IA	1,00	0,17	0,06	0,18	0,72	0,82	1,20
Objectif	> 0,5*	–	< 1,5*	< 0,3***	> 0,65**	–	< 0,80**
Valeur parfaite	1	0	0	0	1	1	0

*D'après CHANG et HANNA [2005], **d'après THUNIS *et al.* [2012], ***d'après EU [2008] pour la modélisation annuelle des concentrations en NO₂.

Tableau II. Comparaison entre modèles CFD et IA sur les résultats de concentrations mensuelles en NO₂ pour les différents critères de performances considérés

Une coupe horizontale des concentrations moyennes mensuelles en NO₂ obtenues à une hauteur de 3,5 m par les modèles CFD et IA est proposée en *figure 5* afin de pouvoir comparer spatialement les résultats obtenus. Ces coupes intègrent également les concentrations moyennes mensuelles observées sur site à l'aide des échantillonneurs passifs. On notera que les concentrations observées sur site ne sont pas systématiquement à la hauteur retenue pour la comparaison (3,5 m), car la hauteur des échantillonneurs pouvait varier de quelques mètres. D'après les résultats présentés sur cette figure, et sauf quelques exceptions, les deux modèles génèrent des niveaux de concentration en dioxyde d'azote similaires au niveau des différentes rues. Si l'on compare

les résultats obtenus avec les mesures mensuelles réalisées par le biais des échantillonneurs passifs, on observe également que les concentrations modélisées sont proches de celles observées, même s'il existe quelques disparités entre les deux modèles. Afin de mieux apprécier ces différences, un agrandissement de la *figure 5* est donné en *figure 6*. Si l'on s'intéresse à la *figure 6(A1)*, représentant une partie des résultats CFD, on peut constater que le modèle a très bien su reproduire les disparités de concentrations en dioxyde d'azote au niveau des rues, comme dans les zones (a) et (d). Au-delà de cela, les disparités de concentrations en NO₂ à l'intérieur même des rues ont également été correctement modélisées par le modèle

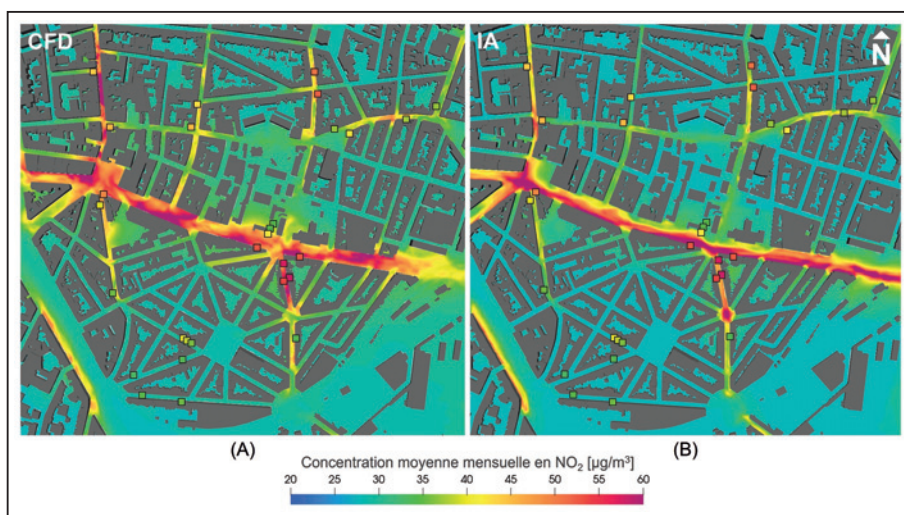


Figure 5. Cartographie des concentrations moyennes mensuelles en dioxyde d'azote NO₂ modélisées (A) avec le modèle CFD et (B) avec le modèle IA pour la période du 30 avril au 28 mai 2016 et comparaison avec les concentrations moyennes relevées sur site à l'aide des analyseurs passifs

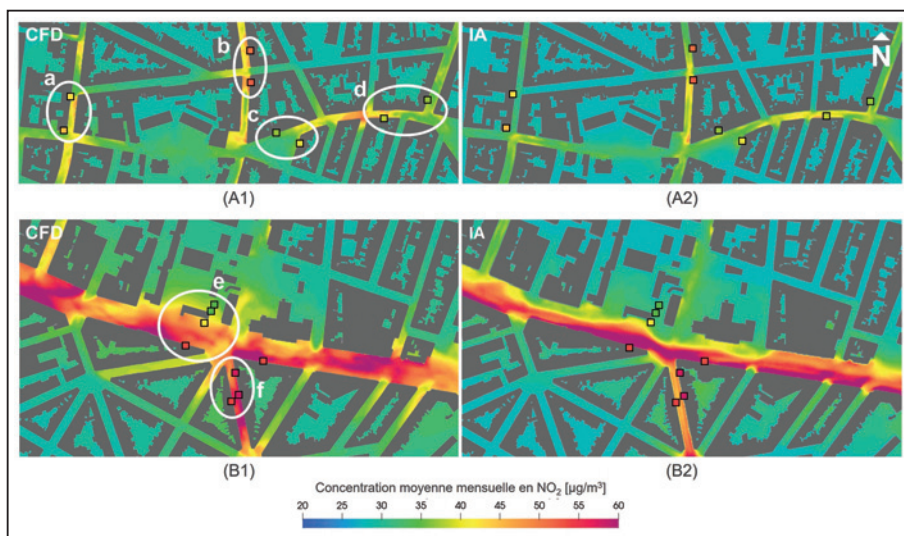


Figure 6. Agrandissement au niveau de deux zones clés des cartographies des concentrations moyennes mensuelles en dioxyde d'azote NO₂ modélisées (A1 et B1) avec le modèle CFD et (A2 et B2) avec le modèle IA pour la période du 30 avril au 28 mai 2016 et comparaison avec les concentrations moyennes relevées sur site à l'aide des analyseurs passifs

CFD, comme dans la zone (b) où deux zones de fortes concentrations en polluants ont été correctement reproduites par le modèle du côté droit de la rue (autour des $48 \mu\text{g}/\text{m}^3$ pour des mesures autour de $52 \mu\text{g}/\text{m}^3$). Enfin, si l'on s'intéresse à la zone (c), on constate que le modèle CFD a modélisé des concentrations en NO_2 venant lécher les bâtiments situés sur la droite de cette zone, tandis que des concentrations plus faibles ont été modélisées pour les bâtiments situés à gauche, conformément à ce qui a pu être obtenu par la mesure des échantillonneurs passifs. D'un point de vue quantitatif, les concentrations mensuelles en NO_2 modélisées au niveau des zones (a), (c) et (d) sont très proches des concentrations observées, et ont été très légèrement sous-estimées au niveau de la zone (b). D'après la *figure 6(A2)*, le modèle d'IA est également en mesure de correctement reproduire les disparités de concentrations au niveau des rues et à l'intérieur de celles-ci. Les niveaux de concentration ont tendance toutefois à être légèrement sous-estimés (10 % de sous-estimation en moyenne sur la zone agrandie).

Si l'on s'intéresse à présent à la zone où les concentrations en dioxyde d'azote sont les plus élevées (le long de l'axe routier transversal majeur de la zone d'étude), les mêmes observations peuvent être réalisées. En effet, d'après la *figure 6(B1)*, le modèle CFD est également en mesure de discerner les côtés des rues les plus impactés par la dispersion de la pollution en NO_2 . Dans la zone (f), par exemple, le modèle montre des concentrations plus élevées au niveau de la partie droite de la rue, avec des concentrations frôlant les $60 \mu\text{g}/\text{m}^3$, tandis qu'en partie gauche de cette même rue, les concentrations modélisées sont plutôt de l'ordre de 50 à $55 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Ces résultats sont confirmés par les mesures des échantillonneurs passifs qui ont relevé des concentrations quasi identiques. Ce constat est d'autant plus flagrant dans la zone (e). En effet, au niveau de cette zone, quatre échantillonneurs passifs alignés montrent que les concentrations en dioxyde d'azote décroissent à mesure que l'on se dirige vers le nord de la zone et que l'on s'enfonce au travers du tissu urbain. Cette observation est presque parfaitement reproduite par le modèle CFD, autant en matière d'évolution spatiale des concentrations en dioxyde d'azote, qu'en matière de niveau de concentration. Si l'on compare à nouveau ces résultats avec ceux obtenus par le modèle d'IA, la *figure 6(B2)* nous montre qu'une nouvelle fois le modèle d'IA engendre les mêmes tendances que le modèle CFD. En effet, l'évolution spatiale des concentrations en NO_2 est également bien reproduite par le modèle d'IA dans la zone (e), avec une légère surestimation (7 %

de la concentration en NO_2 dans la partie la plus exposée de la rue. Les concentrations modélisées au niveau de la zone (f) sont quant à elles légèrement sous-estimées (10 % de sous-estimation par rapport aux mesures).

D'après les résultats obtenus précédemment, les modèles de CFD et d'IA sont tous deux en mesure d'évaluer les concentrations mensuelles en dioxyde d'azote en milieu urbain, conformément aux objectifs de performance des modèles de dispersion de la pollution atmosphérique ainsi qu'à la directive européenne relative à la qualité de l'air (en appliquant la performance souhaitée pour une modélisation annuelle, plus restrictive que la modélisation horaire en matière de performance). Dans ce second exercice, c'est le modèle CFD qui a obtenu les meilleures performances, tant du point de vue de l'évolution spatiale des concentrations en dioxyde d'azote que du point de vue de la bonne estimation des niveaux de concentration. Le modèle d'IA quant à lui, bien que légèrement en retrait sur cet exercice, procure toutefois également de très bons résultats qu'il est nécessaire de considérer en parallèle de ses autres avantages, et notamment sa rapidité et sa frugalité, limitant dans le même temps son impact environnemental par rapport au modèle CFD. En effet, le modèle d'IA a permis l'obtention des concentrations mensuelles en dioxyde d'azote en quelques jours (8783 scénarios horaires à modéliser et à concaténer), tandis que, vu l'ampleur considérable de la zone d'intérêt, le modèle CFD a nécessité près de quatre mois de calcul en continu. Enfin, le dernier point important à noter concerne les hypothèses de calcul des deux modèles, et plus particulièrement la non-prise en compte des effets thermiques et de la chimie réactionnelle des oxydes d'azote. De très bons résultats ont été obtenus malgré ces deux hypothèses fortes dont l'absence aurait engendré plus de temps de calcul et, également, plus de sources d'incertitudes.

Conclusion

L'objectif de l'étude était de réaliser une comparaison conjointe entre un modèle de mécanique des fluides numérique (CFD) et un modèle d'intelligence artificielle (IA) de dispersion des polluants de l'air appliqués sur une partie de la ville d'Anvers en Belgique afin d'évaluer les apports et les faiblesses des deux approches dans un contexte opérationnel d'ingénierie. Les résultats obtenus par ces deux modèles ont été comparés avec des données horaires de concentration en dioxyde d'azote (NO_2) mesurées au niveau d'une station de mesure permanente ainsi que des données mensuelles

de concentration en NO₂ au niveau de 28 emplacements obtenus à l'aide d'échantillonneurs passifs. Les conclusions majeures de cette étude sont les suivantes :

- 1) Les deux modèles (CFD et IA) respectent la quasi-totalité des indicateurs de performance des modèles de qualité de l'air, et sont en adéquations avec les exigences de la directive cadre européenne relative à la qualité de l'air (2008/50/EC) en matière d'erreur tolérée sur les concentrations modélisées en NO₂.
- 2) La modélisation par mécanique des fluides numérique (CFD) est valide pour une utilisation opérationnelle dans le cadre d'études de qualité de l'air, et notamment pour l'évaluation des concentrations mensuelles en NO₂ en milieu urbain, avec 13 % d'erreur par rapport aux concentrations mensuelles réelles sur la zone d'étude. Son utilisation à des fins de modélisations horaires est moins pertinente, avec une erreur de près de 31 % ainsi que des temps de calcul non adaptés à de la modélisation quasi-temps réel.
- 3) La modélisation par intelligence artificielle (IA) est valide pour une utilisation opérationnelle dans le cadre

d'études de qualité de l'air, à la fois pour l'évaluation des concentrations mensuelles en NO₂ en milieu urbain, avec 18 % d'erreur par rapport aux concentrations mensuelles réelles, et pour l'évaluation des concentrations horaires en NO₂, avec 17 % d'erreur par rapport aux concentrations horaires réelles. Vu les faibles temps de calcul qui lui sont nécessaires, son utilisation à des fins de modélisation quasi-temps réel est très pertinente, notamment comme outil de suivi de la qualité de l'air au niveau d'une ville, ou encore comme outil d'aide à la décision ou d'évaluation rapide de scénarios.

Remerciements

Les auteurs souhaitent remercier la communauté Fairmode de leur avoir permis d'intégrer le forum, de participer aux projets d'intercomparaison des modèles de qualité de l'air européens et d'avoir fourni les données expérimentales nécessaires à la réalisation du présent travail.

Bibliographie

- AGATHOKLEOUS E., SICARD P. (2021) : « Editorial overview: Current and future challenges of air pollution ». *Current Opinion in Environmental Science and Health* ; 21 : 100246.
- AIRPARIF (2016) : « Inventaire régional des émissions en Île-de-France – Année de référence 2012 – éléments synthétiques ». Édition mai 2016. 32.
- BÄCHLIN W., BÖSINGER R., BRANDT A., SCHULTZ T. (2008) : « Überprüfung des NO-NO₂-Umwandlungsmodells für die Anwendung bei Immissionsprognosen für bodennahe Stickoxidfreisetzung ». *Reinhalung der Luft*; 66 : 154-7.
- BLOCKEN B. (2014) : « 50 years of computational wind engineering: Past, present and future ». *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* ; 129 : 69-102.
- BROCHETON F., BARA C. (2023) : « Une approche innovante mesure-modélisation pour caractériser l'impact odorant d'une installation ». *Techniques Sciences Méthodes*; 7-8 : 45-8.
- CHANG J. C., HANNA S.R. (2004) : « Air quality model performance evaluation ». *Meteorology and Atmospheric Physics*; 87(1-3) : 167-93.
- CHANG J.C., HANNA S.R. (2005) : « Technical descriptions and user's guide for the BOOT statistical model evaluation software package, Version 2.0 ». 64 p. Disponible en ligne : https://www.harmo.org/Kit/Download/BOOT_UG.pdf
- CHEN H., KWONG J.C., COPES R., TU K., VILLENEUVE P.J., VAN DONKELAAR A., et al. (2017) : « Living near major roads and the incidence of dementia, Parkinson's disease, and multiple sclerosis: a population-based cohort study ». *The Lancet*; 389(10070) : 718-26.
- DE CRAEMER S., VERCAUTEREN J., FIERENS F., LEFEBVRE W., MEYSMAN F.J.R. (2020) : « Using large-scale NO₂ data from citizen science for air-quality compliance and policy support ». *Environmental Science & Technology*; 54(18) : 11070-8.
- EEA (European Environment Agency) (2019) : *Air quality in Europe : 2019. Report.*
- EU (2008) : *Directive 2008/50/EC of the European Parliament and of the Council of 21 May 2008 on ambient air quality and cleaner air for Europe.*
- FRANKE J., HELLSTEN A., SCHLÜNZEN H., CARISSIMO B. (2007) : « Best practice guideline for the CFD simulation of flows in the urban environment ». *COST Action 732.*
- IBTEHAZ N., RAHMAN M.S. (2020) : « MultiResUNet : Rethinking the U-Net architecture for multimodal biomedical image segmentation ». *Neural Networks*; 121: 74-87.
- JANSSEN S., DUMONT G., FIERENS F., MENSINK C. (2008) : « Spatial interpolation of air pollution measurements using CORINE land cover data ». *Atmospheric Environment*; 42(20) : 4884-903.
- JAUBERT J.-N. (2022) : « Le caractère odorant de la pollution de l'air ». *Techniques Sciences Méthodes*; (7-8): 25-47.
- JOURDAIN F. (2007) : « Modélisation des transferts atmosphériques de polluants ». *Techniques de l'ingénieur*; 11.
- JURADO X., REIMINGER N., BENMOUSSA M., VAZQUEZ J., WEMMERT C. (2022) : « Deep learning methods evaluation to predict air quality based on Computational Fluid Dynamics ». *Expert Systems with Applications*; 203 : 117294.

- JURADO X., REIMINGER N., MAURER L., VAZQUEZ J., WEMMERT C. (2023) : « On the correlations between particulate matter: Comparison between annual/monthly concentrations and PM10/PM2.5 ». *Atmosphere*; 14(2) : 385.
- LI Z., ZHANG H., WEN C.-Y., YANG A.-S., JUAN Y.-H. (2020) : « Effects of height-asymmetric street canyon configurations on outdoor air temperature and air quality ». *Building and Environment*; 183 : 107195.
- MANISALIDIS I., STAVROPOULOU E., STAVROPOULOS A., BEZIRTZOGLU E. (2020) : « Environmental and health impacts of air pollution: a review ». *Frontiers in Public Health*; 8 : 14.
- MICHELOT N., CARREGA P., ROUÏL L. (2015) : « Panorama de la modélisation de la dispersion atmosphérique. Atmospheric dispersion models: An overview ». *Pollution Atmosphérique*; N° spécial : 92-100.
- PANTUSHEVA M., MITKOV R., HRISTOV P. O., PETROVA-ANTONOVA D. (2022) : « Air pollution dispersion modelling in urban environment using CFD: a systematic review ». *Atmosphere*; 13(10) : 1640.
- REIMINGER N., JURADO X., VAZQUEZ J., WEMMERT C., BLOND N., DUFRESNE M., WERTEL J. (2020a) : « Effects of wind speed and atmospheric stability on the air pollution reduction rate induced by noise barriers ». *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*; 200(32) : 104160.
- REIMINGER N., JURADO X., VAZQUEZ J., WEMMERT C., BLOND N., WERTEL J., DUFRESNE M. (2020b) : « Methodologies to assess mean annual air pollution concentration combining numerical results and wind roses ». *Sustainable Cities and Society*; 59(11) : 102221.
- REIMINGER N., VAZQUEZ J., BLOND N., DUFRESNE M., WERTEL J. (2020c) : « CFD evaluation of mean pollutant concentration variations in step-down street canyons ». *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*; 196 : 104032.
- REIMINGER N., JURADO X., MAURER L., VAZQUEZ J., WEMMERT C. (2024) : « Modeling NO₂ concentrations in real urban areas using computational fluid dynamics: A comparative analysis of methods to assess NO₂ concentrations from NO_x dispersion results ». *Sustainable Cities and Society*; 103 : 105286.
- RICHARDS P.J., NORRIS S.E. (2011) : « Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited ». *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*; 99(4) : 257-66.
- SANCHEZ B., SANTIAGO J.L., MARTILLI A., MARTIN F., BORGE R., QUAASSDORFF C., DE LA PAZ D. (2017) : « Modelling NO_x concentrations through CFD-RANS in an urban hot-spot using high resolution traffic emissions and meteorology from a mesoscale model ». *Atmospheric Environment*; 163 : 155-65.
- SANTÉ PUBLIQUE FRANCE (2021) : *Pollution de l'air ambiant : nouvelles estimations de son impact sur la santé des Français*.
- SUDALMA S., PURWANTO P., SANTOSO L.W. (2015) : « The effect of SO₂ and NO₂ from transportation and stationary emissions sources to SO₄²⁻ and NO₃⁻ in rain water in Semarang ». *Procedia Environmental Sciences*; 23 : 247-52.
- THUNIS P. (2018) : « On the validity of the incremental approach to estimate the impact of cities on air quality ». *Atmospheric Environment*; 173 : 210-22.
- THUNIS P., GEORGIEVA E., PEDERZOLI A. (2012) : « A tool to evaluate air quality model performances in regulatory applications ». *Environmental Modelling & Software*; 38 : 220-30.
- UNITED NATIONS (2019) : *World urbanization prospects: The 2018 revision (ST/ESA/SER.A/420)*. New York: United Nations.
- VRANCKX S., VOS P., MAIHEU B., JANSSEN S. (2015) : « Impact of trees on pollutant dispersion in street canyons: A numerical study of the annual average effects in Antwerp, Belgium ». *Science of the Total Environment*; 532 : 474-83.
- WHO (Ed.) (2005) : *WHO Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide. Global update 2005*. World Health Organization.
- WHO (2016) : *Mortality and burden of disease from ambient air pollution, Global Health Observatory data*. World Health Organization.
- WHO (2021) : *WHO global air quality guidelines: particulate matter (PM2.5 and PM10), ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and carbon monoxide*. World Health Organization.
- WU J., YE Q., FANG L., DENG L., LIAO T., LIU B., et al. (2022) : « Short-term association of NO₂ with hospital visits for chronic kidney disease and effect modification by temperature in Hefei, China: A time series study ». *Ecotoxicology and Environmental Safety*; 237 : 113505.
- XIE X., HUANG Z., WANG J. (2006) : « The impact of urban street layout on local atmospheric environment ». *Building and Environment*; 41(10) : 1352-63.
- YAKHOT V., ORSZAG S.A., THANGAM S., GATSKI T.B., SPEZIALE C.G. (1992) : « Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique ». *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*; 4(7) : 1510-20.
- YUE H., YANG X., JI X., WU X., LI G., SANG N. (2022) : « Time series of transcriptome analysis in entire lung development stages provide insights into the origin of NO₂ related lung diseases ». *Environment International*; 168 : 107454.

Annexe A

Avec M les concentrations modélisées et O les concentrations observées.

- **FAC2** (FACtor of modeled values within a factor of two of observations) :

$$FAC2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N n_i \text{ avec } \begin{cases} n_i = 1 & \text{pour } 0,5 \leq |M_i/O_i| \leq 2 \\ n_i = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

- **MFE** (Mean Fractional Error) :

$$MFE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|M_i - O_i|}{(M_i + O_i)/2}$$

- **MRE** (Mean Relative Error) :

$$MRE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|M_i - O_i|}{O_i}$$

- **NMSE** (Normalized Mean Squared Error) :

$$NMSE = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - M_i)^2}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i}$$

- **R** (coefficient de corrélation de Pearson) :

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}$$

- **NSD** (Normalized Standard Deviation) :

$$NSD = \frac{\sigma_M}{\sigma_O}$$

- **Target** :

$$Target = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O}_i)^2}}$$



IBAK

Paré pour l'avenir - relevé d'état automatisé soutenu par l'intelligence artificielle



www.ibak.fr