



**HAL**  
open science

## Optimisation d'un modèle atmosphérique transnational de prédiction de la concentration journalière d'ozone : intégration de paramètres météorologiques pour une évaluation de l'exposition à l'échelle kilométrique

Honorine Gauthier-Manuel, Frédéric Mauny, Mathieu Boilleaut, Marie Ristori, Sophie Pujol, Anne-Laure Parmentier, Nadine Bernard

### ► To cite this version:

Honorine Gauthier-Manuel, Frédéric Mauny, Mathieu Boilleaut, Marie Ristori, Sophie Pujol, et al.. Optimisation d'un modèle atmosphérique transnational de prédiction de la concentration journalière d'ozone : intégration de paramètres météorologiques pour une évaluation de l'exposition à l'échelle kilométrique. 34ème colloque de l'Association Internationale de Climatologie, Jul 2021, Casablanca, Maroc. hal-03552163

**HAL Id: hal-03552163**

**<https://hal.science/hal-03552163>**

Submitted on 2 Feb 2022

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# OPTIMISATION D'UN MODELE ATMOSPHERIQUE TRANSNATIONAL DE PREDICTION DE LA CONCENTRATION JOURNALIERE D'OZONE : INTEGRATION DE PARAMETRES METEOROLOGIQUES POUR UNE EVALUATION DE L'EXPOSITION A L'ECHELLE KILOMETRIQUE

HONORINE GAUTHIER-MANUEL<sup>1,2</sup>, FREDERIC MAUNY<sup>1,2</sup>, MATHIEU BOILLEAUT<sup>4</sup>, MARIE RISTORI<sup>4</sup>, SOPHIE PUJOL<sup>1,2</sup>, ANNE-LAURE PARMENTIER<sup>1,2</sup>, NADINE BERNARD<sup>1,3</sup>

1 : Laboratoire Chrono-Environnement, UMR 6249, CNRS - Université de Franche-Comté, UsC INRA, Besançon, France ([honorine.gauthier-manuel@univ-fcomte.fr](mailto:honorine.gauthier-manuel@univ-fcomte.fr))

2 : Centre Hospitalier Universitaire, uMETH Inserm CIC 1431, Besançon, France

3 : Laboratoire ThéMA, UMR 6049, CNRS, Université Bourgogne-Franche-Comté, Besançon, France

4 : ATMO Bourgogne-Franche-Comté, Besançon, France

## Résumé :

L'ozone ( $O_3$ ) est un polluant atmosphérique secondaire formé lors de réactions photochimiques, en présence de précurseurs ( $NO_x$ , COV, CO). L'exposition à l' $O_3$  est délicate à modéliser car ce polluant présente une forte variabilité spatio-temporelle. Le but des présents travaux est d'optimiser l'évaluation des concentrations journalières d' $O_3$  modélisées à échelle kilométrique, à l'aide de modèles MARS et de données météorologiques. La plateforme de modélisation PREVEST a généré une prédiction de concentrations maximales journalières d' $O_3$  pour un maillage de 3km de côté. La station de mesure de la qualité de l'air du réseau ATMO-Bourgogne-Franche-Comté, Besançon-Prévoyance (France) a enregistré quotidiennement les niveaux d'exposition à l' $O_3$ . Les données modélisées ont été comparées aux concentrations journalières mesurées localement. Des modèles MARS (Multivariate Adaptive Regression Splines) ont été utilisés pour optimiser l'évaluation des concentrations d' $O_3$  à l'échelle kilométrique à l'aide de données météorologiques (température, humidité relative, vitesse du vent, hauteur de précipitations). Les variables météorologiques étaient significativement associées aux écarts modèle-mesure, en particulier la température. La prise en compte des variables météorologiques mesurées localement permet d'améliorer l'évaluation de concentrations journalières d' $O_3$ . Dans un contexte de changement climatique et d'épisodes récurrents de vagues de chaleur, l'influence de la température apparaît donc centrale dans l'optimisation de modèles atmosphériques.

**Mots-clés :** Ozone, exposition à échelle fine, variables météorologiques, optimisation.

## Abstract:

Ozone ( $O_3$ ) is a secondary atmospheric pollutant produced by photochemical reactions, in presence of precursors ( $NO_x$ , COV, CO). Ozone exposure is complex to assess because this pollutant is highly variable in space and time. The aim of this work is to optimize the assessment of ozone concentrations at the kilometric scale using MARS models and meteorological data. The modelling platform PREVEST provided daily maximum ozone concentrations on a 3km grid. The air quality monitoring station of Besançon-Prévoyance (France) measured the daily ozone concentrations. The modelled data have been compared to the local measurements. MARS (Multivariate Adaptive Regression Splines) have been used to optimize the assessment of ozone exposure concentrations at the kilometric scale using meteorological data measured locally (temperature, relative humidity, wind speed, rainfall). The meteorological variables were significantly associated with discrepancy between modelled and measured concentrations. This was particularly the case for temperature. Taking locally-measured meteorological variables into account improves the assessment of daily  $O_3$  concentration. In a context of climate change and recurrent heat waves, the influence of temperature appears to be central in the optimization of atmospheric models.

**Keywords:** Ozone, fine-scale exposure, meteorological variables, optimization

## 1. Introduction

Les polluants photo-oxydants de l'air (PAN, ozone ( $O_3$ )) présentent un enjeu sanitaire et environnemental majeur (Royal Society (Great Britain), 2008; Zhang et al., 2019). Ces préoccupations sont grandissantes face à l'élévation globale de la température de l'air dû au changement climatique et aux relations étroites entre comportement des photo-oxydants dans l'atmosphère (dispersion et transformation) et conditions météorologiques (Royal Society (Great Britain), 2008). L' $O_3$  est un polluant atmosphérique secondaire, formé lors de réactions photochimiques en présence de précurseurs (composés organiques volatiles (COV), oxydes d'azote ( $NO_x$ )) et sous l'influence de rayonnements solaires. La température, l'humidité relative et la vitesse des vents influent également sur les réactions photochimiques impliquées dans la formation et la dispersion de l' $O_3$  (Ramos et al., 2018; Royal Society, 2008). Ce polluant

présente une forte variabilité dans le temps (saisonnalité, cycle nycthéral) et dans l'espace (Castell-Balaguer et al., 2012). C'est pourquoi l'évaluation des niveaux d'exposition humaine à l'O<sub>3</sub> est complexe.

L'O<sub>3</sub> a des impacts reconnus sur la santé humaine (Brunekreef and Holgate, 2002; Zhang et al., 2019). Il est à l'origine de troubles du système respiratoire et cardio-vasculaire, et engendre l'irritation des muqueuses des yeux et du nez (Bejot et al., 2011; Nuvolone et al., 2018; Zhang et al., 2019). Les outils de modélisation des concentrations d'O<sub>3</sub> ont connu un essor important durant les dernières décennies. La plateforme de modélisation PREVEST, produit une évaluation journalière des concentrations d'O<sub>3</sub> à échelle transnationale (France, Allemagne, Suisse, Luxembourg). Cette continuité spatiale de l'information permet d'évaluer l'exposition à l'O<sub>3</sub> sur une large emprise spatiale. Toutefois, l'utilisation de données de modélisation pour évaluer l'exposition humaine à ce polluant, nécessite précision et exactitude. Steven Porter et ses collaborateurs (2015) ont suggéré que les outils de modélisation pouvaient présenter des biais et des inexactitudes, et pouvaient demander des améliorations avant d'entrer en application dans des études épidémiologiques.

Dans le cadre de notre étude, nous disposons de concentrations journalières d'O<sub>3</sub> calculées à échelle transnationale par la plateforme de modélisation PREVEST, sur un maillage à échelle kilométrique. L'objectif des présents travaux était d'optimiser l'évaluation des concentrations journalières d'O<sub>3</sub> modélisées à échelle kilométrique, en intégrant des variables météorologiques dans des modèles MARS. Cette optimisation pourrait permettre de mieux évaluer l'exposition humaine à ce polluant.

## **2. Données et méthodes :**

### **2.1 Concentrations d'ozone**

Les concentrations maximales journalières mesurées ([O<sub>3</sub>]<sub>mesurée</sub>) par la station de mesure fixe d'O<sub>3</sub> de Besançon-Prévoyance au cours de l'année 2018 ont été fournies par le réseau régional de surveillance de la qualité de l'air d'ATMO Bourgogne-Franche-Comté. Les concentrations maximales journalières modélisées ([O<sub>3</sub>]<sub>modélisée</sub>) sur la commune de Besançon sont issues de la plateforme de modélisation PREVEST, développée et gérée par ATMO Grand-Est. Cette plateforme génère un maillage de 3km de côté qui s'étend sur le quart Nord-Est de la France, la Suisse, le Luxembourg et une partie de l'Allemagne. Le modèle PREVEST couple le modèle national de chimie-transport de l'air CHIMERE (Mailler et al., 2017; Menut et al., 2013; Valari et al., 2011) et le modèle météorologique WRF (Weather Research and Forecasting), utilisé dans de nombreux outils de simulation de la qualité de l'air (Thunis et al., 2016).

L'écart entre les concentrations modélisées et celles mesurées est calculé afin d'estimer la validité des concentrations modélisées par le modèle PREVEST :

$$\text{Écart modèle-mesure} = [\text{O}_3]_{\text{modélisée}} - [\text{O}_3]_{\text{mesurée}}$$

### **2.2 Variables météorologiques**

Les variables météorologiques prises en compte sont : température quotidienne maximale (°C), humidité relative moyenne (%), hauteur de précipitations (mm) et vitesse de vent maximale instantanée (m.s<sup>-1</sup>). Elles ont été mesurées quotidiennement par la station Météo France de Besançon. La distance entre la station de mesure d'O<sub>3</sub> (Besançon-Prévoyance) et la station Météo France de Besançon est de 1,95 km. Les variables météorologiques listées précédemment sont ensuite utilisées comme variables explicatives de l'écart modèle-mesure dans des modèles MARS (Multivariate Adaptive Regression Splines).

## 2.3 Modèles MARS et optimisation des concentrations modélisées

Les MARS (Multivariate Adaptive Regression Splines) sont une méthode de régression multivariée non-paramétrique proposée par Friedman en 1991 (Friedman, 1991; Friedman and Roosen, 1995). Ils permettent de générer des régressions non-linéaires dites segmentées (« piecewise linear regression ») en identifiant des « turning points » dans la relation entre la variable à prédire et un ensemble de variables explicatives (Boehmke and Greenwell, 2019). Les variables sont sélectionnées automatiquement par le modèle grâce à une procédure « forward-backward » qui permet d'intégrer les variables contribuant de manière significative au modèle tout en évitant la production d'un modèle sur-ajusté.

Dans un premier temps, l'influence de chaque variable météorologique est considérée isolément en construisant quatre modèles prenant en compte chaque variable seule. Dans un second temps, un cinquième modèle prenant en compte les quatre variables météorologiques est construit, avec de possibles interactions entre les variables du modèle.

Enfin, le modèle MARS permet de modéliser mais surtout de prédire l'écart modèle-mesure en fonction des variables explicatives choisies. Cette prédiction de l'écart permet *in fine* d'ajuster les concentrations journalières d'ozone modélisées :

$$[\text{O}_3]_{\text{modélisée corrigée}} = [\text{O}_3]_{\text{modélisée}} - \text{écart modèle-mesure prédit par le modèle MARS}$$

## 3. Résultats

### 3.1 Effet dissocié de variables météorologiques sur l'écart modèle-mesure

La série temporelle des concentrations d'ozone modélisées brutes, mesurées, et corrigées avec les modèles MARS intégrant séparément chaque variable météorologique est présentée en Figure 1. La correction la plus efficace est celle prenant en compte la température maximale ( $R^2 = 0,366$ ) (Figure 1.A), suivie de l'humidité relative ( $R^2 = 0,259$ ) (Figure 1.B) et la vitesse de vent maximale instantanée ( $R^2 = 0,114$ ) (Figure 1.C). Le modèle prenant en compte la température maximale journalière reproduit mieux les oscillations des mesures (Figure 1.A) en particulier au cours de la période printanière et estivale. L'amplitude des variations inter-journalières des concentrations d' $\text{O}_3_{\text{mesurée}}$  est forte. Les valeurs d' $\text{O}_3_{\text{modélisée}}$  brutes ne présentent pas une telle variabilité inter-journalière et tendent à lisser cette série temporelle. La prise en compte de la vitesse de vents maximale instantanée permet de mieux représenter les baisses de concentrations, notamment lors de la période hivernale (octobre à janvier) (Figure 1.C). Enfin, la hauteur de précipitations quotidienne ne présente aucune association significative avec l'écart modèle-mesure (le seul terme introduit dans le modèle étant l'intercept) (Figure 1.D).

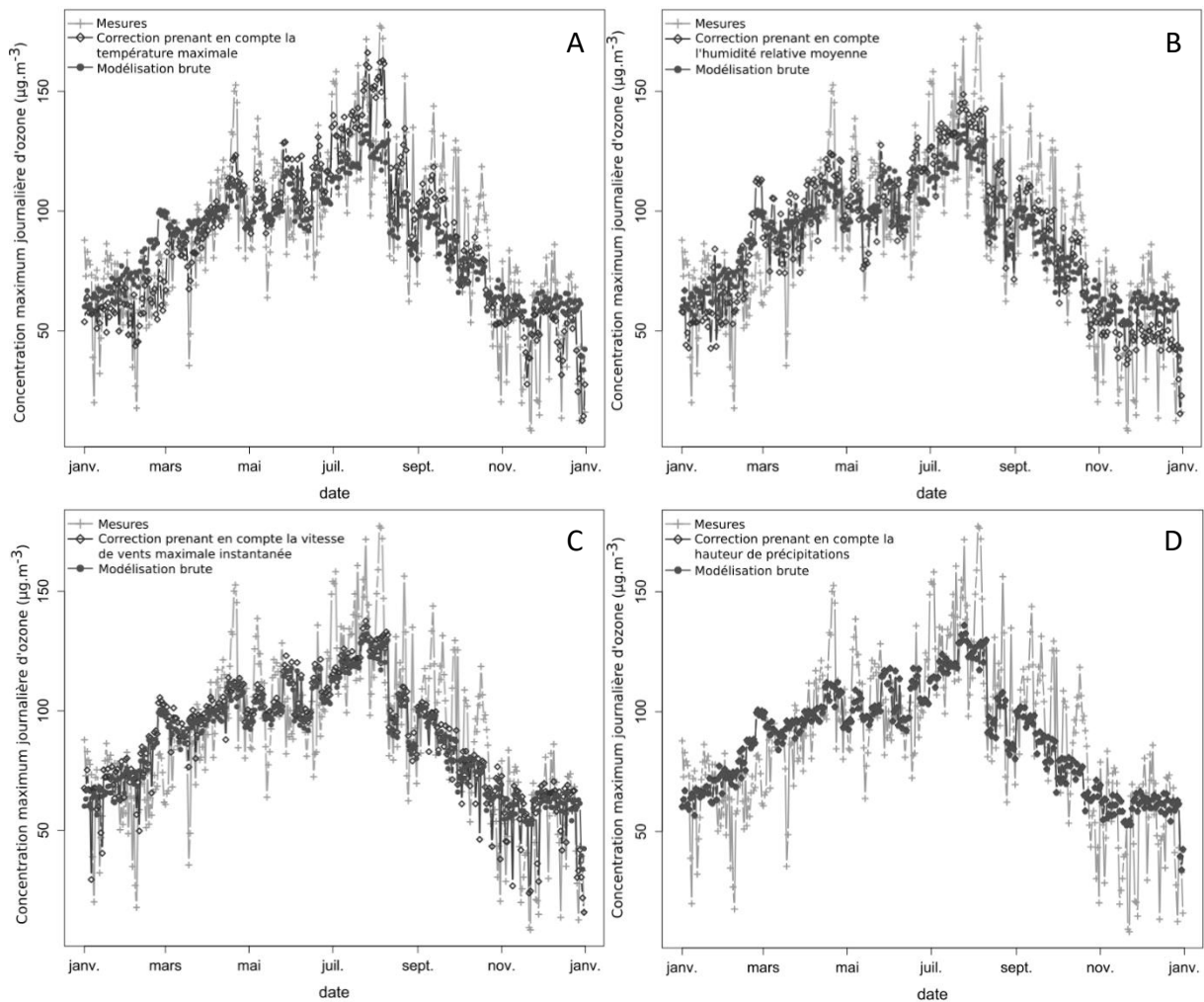


Figure 2: Concentration d'ozone journalière mesurée, modélisée brute (PREVEST), et corrigée avec l'une des variables météorologiques suivantes : température maximale (A), humidité relative moyenne (B), vitesse maximale instantanée de vents (C), hauteur de précipitations (D) ; à Besançon-Prévoyance en 2018

### 3.2 Effet combiné de variables météorologiques sur l'écart modèle-mesure

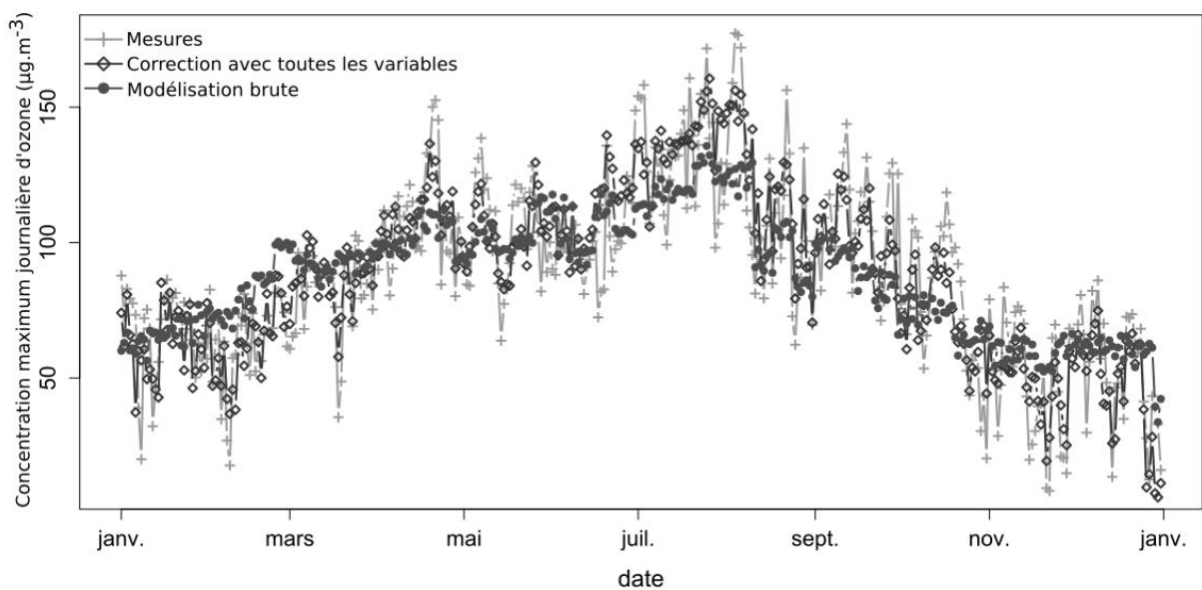


Figure 1 : Concentration d'ozone maximale journalière mesurée, modélisée brute (PREVEST), et corrigée à l'aide de quatre variables météorologiques (température maximale, humidité relative moyenne, vitesse maximale instantanée de vents, hauteur de précipitations), à Besançon-Prévoyance en 2018.

La Figure 2 présente la série temporelle des concentrations d'ozone modélisées brutes, mesurées, et corrigées avec les modèles MARS intégrant les quatre variables météorologiques. Cette correction est efficace et permet d'obtenir un meilleur suivi des pics de concentrations tout au long de l'année. Les valeurs d' $O_3$  modélisée corrigée contrastent avec celles d' $O_3$  modélisée qui ne présentent que peu de variabilité inter-journalière.

### **3.3 Comparaison de l'effet combiné des quatre variables météorologiques et de l'effet de la température maximale**

L'efficacité de la correction incluant les quatre variables météorologiques (Figure 2) est comparée à celle qui présentait le meilleur résultat dans la section 3.1 (température maximale, Figure 1.A). La correction intégrant les quatre variables météorologiques s'avère plus efficace ( $R^2 = 0,493$ ) que celle intégrant la température maximale ( $R^2 = 0,366$ ), en particulier au niveau des baisses de concentrations. Ce modèle permet une oscillation plus forte des concentrations et une variabilité des concentrations proches de celle des mesures. La complémentarité des variables offre une correction plus précise tout au long de l'année considérée.

## **4. Discussion :**

L'intégration au modèle de plusieurs variables météorologiques mesurées localement a permis d'optimiser l'évaluation des concentrations journalières d' $O_3$  à l'échelle kilométrique. La variable température maximale journalière a une influence marquée sur l'écart modèle-mesure. Elle fournit une correction efficace sur les pics printaniers et estivaux (lissés pour l' $O_3$  modélisée) et lors de forts épisodes d'ensoleillement. Cette variable, fortement corrélée aux rayonnements solaires, catalyse les réactions photochimiques produisant l' $O_3$  (Bernard et al., 1999; Houzé, 2006), elle est donc corrélée positivement avec les concentrations d'ozone. La contribution de la variable vitesse maximale de vent est marquée sur la prédiction des baisses de concentration en  $O_3$ . Cette constatation est en lien avec l'influence du vent sur la dispersion de l' $O_3$ . Cependant, des spécificités locales, telle que la topographie, pourraient réduire l'efficacité de la correction.

La prise en compte simultanée des quatre variables météorologiques offre une correction plus précise que chacune des variables prise isolément. Toutefois, l'apport de la correction intégrant les quatre variables est faible en comparaison à la correction apportée par la seule variable température (Figure 2). La température est disponible dans la majorité des stations météorologiques, ce qui n'est pas le cas des autres variables (comme la vitesse de vents). Afin de répondre au besoin d'optimisation et aux contraintes de disponibilité des données météorologiques sur un large territoire, la correction utilisant uniquement la variable météorologique la plus efficace est à retenir.

## **5. Conclusion :**

La prise en compte de variables météorologiques mesurées localement, tout particulièrement la température maximale, permet d'améliorer l'évaluation de l'exposition journalière à l' $O_3$ . Dans un contexte de changement climatique et d'épisodes récurrents de vagues de chaleur, l'influence de la température apparaît donc centrale dans l'optimisation de modèles atmosphériques. Enfin, l'effet d'une exposition conjointe à des vagues de chaleur et à des concentrations élevées d'ozone reste incertain et constitue un enjeu sanitaire grandissant.

## 6. Bibliographie

- Bejot, Y., Henrotin, J.B., Osseby, G.V., Zeller, M., Cottin, Y., Giroud, M., 2011. Impact of ozone air pollution on ischemic cerebral and cardiac events in Dijon, France. *Arch. Cardiovasc. Dis. Suppl.*, XXIes journées européennes de la société française de cardiologie, 3, **1**, 93. [https://doi.org/10.1016/S1878-6480\(11\)70282-8](https://doi.org/10.1016/S1878-6480(11)70282-8)
- Bernard, N., Gerber, M., Astre, C., Saintot, M., 1999. Ozone Measurement with Passive Samplers: Validation and Use for Ozone Pollution Assessment in Montpellier, France. *Environ. Sci. Technol.* 33, **2**, 217–222. <https://doi.org/10.1021/es971140k>
- Boehmke, B., Greenwell, B.M., 2019. *Hands-On Machine Learning with R*. Chapman and Hall/CRC. <https://doi.org/10.1201/9780367816377>
- Brunekreef, B., Holgate, S.T., 2002. Air pollution and health. *The Lancet.* 360, **9341**, 1233–1242. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(02\)11274-8](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(02)11274-8)
- Castell-Balaguer, N., Téllez, L., Mantilla, E., 2012. Daily, seasonal and monthly variations in ozone levels recorded at the Turia river basin in Valencia (Eastern Spain). *Environ. Sci. Pollut. Res.* 19, **8**, 3461–3480. <https://doi.org/10.1007/s11356-012-0881-5>
- Friedman, J.H., 1991. Multivariate Adaptive Regression Splines. *Ann. Stat.* 19, **1**, 1–67. <https://doi.org/10.1214/aos/1176347963>
- Friedman, J.H., Roosen, C.B., 1995. An introduction to multivariate adaptive regression splines. *Stat. Methods Med. Res.* 4, **3**, 197–217. <https://doi.org/10.1177/096228029500400303>
- Houzé, M.-L., 2006. *Prévision et spatialisation des concentrations en ozone troposphérique en Bourgogne (phdthesis)*. Université de Bourgogne. <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00458793>.
- Mailler, S., Menut, L., Khvorostyanov, D., Valari, M., Couvidat, F., Siour, G., Turquety, S., Briant, R., Tuccella, P., Bessagnet, B., Colette, A., Létinois, L., Markakis, K., Meleux, F., 2017. CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling. *Geosci. Model Dev.* 10, **6**, 2397–2423. <https://doi.org/10.5194/gmd-10-2397-2017>
- Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Colette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., Hodzic, A., Mailler, S., Meleux, F., Monge, J.-L., Pison, I., Siour, G., Turquety, S., Valari, M., Vautard, R., Vivanco, M.G., 2013. CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modelling. *Geosci. Model Dev.* 6, **4**, 981–1028. <https://doi.org/10.5194/gmd-6-981-2013>
- Nuvolone, D., Petri, D., Voller, F., 2018. The effects of ozone on human health. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 25, **9**, 8074–8088. <https://doi.org/10.1007/s11356-017-9239-3>
- Ramos, Y., Requia, W.J., St-Onge, B., Blanchet, J.-P., Kestens, Y., Smargiassi, A., 2018. Spatial modeling of daily concentrations of ground-level ozone in Montreal, Canada: A comparison of geostatistical approaches. *Environ. Res.* 166, 487–496. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2018.06.036>
- Royal Society (Great Britain), 2008. Ground-level ozone in the 21st century: future trends, impacts and policy implications. The Royal Society, London.
- Steven Porter, P., Rao, S.T., Hogrefe, C., Gego, E., Mathur, R., 2015. Methods for reducing biases and errors in regional photochemical model outputs for use in emission reduction and exposure assessments. *Atmos. Environ.* 112, 178–188. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.04.039>
- Thunis, P., Miranda, A., Baldasano, J.M., Blond, N., Douros, J., Graff, A., Janssen, S., Juda-Rezler, K., Karvosenoja, N., Maffei, G., Martilli, A., Rasoloharimahefa, M., Real, E., Viaene, P., Volta, M., White, L., 2016. Overview of current regional and local scale air quality modelling practices: Assessment and planning tools in the EU. *Environ. Sci. Policy*, Multidisciplinary research findings in support to the EU air quality policy: experiences from the APPRAISAL, SEFIRA and ACCENT-Plus EU FP7 projects 65, 13–21. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2016.03.013>
- Valari, M., Menut, L., Chatignoux, E., 2011. Using a Chemistry Transport Model to Account for the Spatial Variability of Exposure Concentrations in Epidemiologic Air Pollution Studies. *J. Air Waste Manag. Assoc.* 61, **2**, 164–179. <https://doi.org/10.3155/1047-3289.61.2.164>
- Zhang, J., Wei, Y., Fang, Z., 2019. Ozone Pollution: A Major Health Hazard Worldwide. *Front. Immunol.* 10, 2518. <https://doi.org/10.3389/fimmu.2019.02518>