



HAL
open science

Vers l'utilisation d'ensembles météorologiques pour la dispersion à courte distance de radionucléides en cas de rejets accidentels dans l'atmosphère : propagation des incertitudes et comparaison à des mesures radiologiques dans l'environnement

Youness El-Ouartassy

► To cite this version:

Youness El-Ouartassy. Vers l'utilisation d'ensembles météorologiques pour la dispersion à courte distance de radionucléides en cas de rejets accidentels dans l'atmosphère : propagation des incertitudes et comparaison à des mesures radiologiques dans l'environnement. Climatologie. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2023. Français. NNT : 2023TOU30295 . tel-04457222v2

HAL Id: tel-04457222

<https://meteofrance.hal.science/tel-04457222v2>

Submitted on 15 May 2024

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le *08/12/2023* par :

Youness EL-OUARTASSY

Vers l'utilisation d'ensembles météorologiques pour la dispersion à courte distance de radionucléides en cas de rejets accidentels dans l'atmosphère : propagation des incertitudes et comparaison à des mesures radiologiques dans l'environnement

JURY

MME. VALÉRIE THOURET
M. ERIC BLAYO
M. YELVA ROUSTAN
M. LIONEL SOULHAC
MME MÉLANIE ROCHOUX
M. YANN RICHEL
M. MATTHIEU PLU

Physicienne, Univ. Toulouse
Professeur, Univ. Grenoble-Alpes
Maître de conférences, ParisTech
Professeur, Univ. Lyon I
Chercheur, CERFACS
Ingénieur de Recherche, IRSN
Directeur de recherche,
Météo-France
Ingénieure de recherche, IRSN
Ingénieur de recherche,
Météo-France

Présidente
Rapporteur
Rapporteur
Examinateur
Examinatrice
Examinateur
Directeur de thèse
Co-directrice de thèse
Invité

École doctorale et spécialité :

SDU2E : Océan, Atmosphère, Climat

Unités de Recherche :

CNRM – Centre National de Recherches Météorologiques, Toulouse

IRSN – Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire, Fontenay-aux-Roses

Directeurs de Thèse :

Matthieu PLU et Irène KORSAKISSOK

Rapporteurs :

Eric BLAYO et Yelva ROUSTAN

*Cette thèse est dédiée à la mémoire de ma mère, Fatima Ait El Mouden (1961–2023),
qui m'a doté d'une éducation digne et qui s'est toujours sacrifiée pour me voir réussir.*

*Aucun hommage ne pourrait être à la hauteur de tes sacrifices,
car tu étais plus qu'une maman !*

Remerciements

A l'issue de ces trois belles années, je souhaite avant tout adresser un grand et sincère merci à mes directeurs de thèse Matthieu Plu et Irène Korsakissok pour la confiance qu'ils m'ont témoignée et leur soutien sans réserve tout au long de ma thèse. Merci pour votre encadrement bienveillant et rigoureux. Merci surtout pour votre disponibilité à toute épreuve et pour le temps précieux que vous m'avez consacré. Je n'aurais pu imaginer meilleur binôme de chefs !

Ma profonde reconnaissance va aussi à mes co-encadrants Laurent Descamps et Laure Raynaud pour les échanges scientifiques et les idées formidables qui m'ont souvent débloquent. Cette thèse et mon accomplissement personnel n'auraient pu être les mêmes sans votre implication !

Un grand merci à Olivier Connan pour son grand travail, dans le cadre du projet DISKRYNOC, afin de mettre en place les stations de mesures continues du ^{85}Kr et le prétraitement des données acquises. Merci pour ton œil expert sur l'expérimentation et l'instrumentation radiologique. Merci également à l'usine Orano La Hague pour la mise à disposition des données originales du terme source.

Je remercie énormément les membres du jury pour le temps dédié à l'évaluation de ce travail et les échanges passionnants lors de la soutenance.

Je tenais à remercier également certains professeurs qui ont eu un rôle prépondérant dans la poursuite de mes études, en particulier M. Rachid Mesrar (2014-2017), M. Driss Bari (2018) et M. Ghislain Picard (2020), ainsi que Bertrand Cluzet de m'avoir initié à la recherche via mon stage de fin d'études (2019).

Merci à tous ceux qui m'ont fait part de leur expertise scientifique pour mener à bien ces travaux : Thomas Rieutord, Alexandre Albert-Aguilar, Raphaël Perillat, Arnaud Mounier, Arnaud Querel, Alexis Doerenbecher et autres.

Merci à mes amis et à toutes belles rencontres qui ont éclairé ces trois années : Carole Labadie, Clément Brochet, Bachar Tarraf, Basile Gandon, Gabriel Moldovan, Jeremy Ottaviano, Elisa Chardon-Legrand...bref, toute l'équipe PREV avec laquelle j'ai partagé de très bons moments notamment lors de nos pauses exceptionnelles. Je mesure la chance de travailler entouré de personnes amicales et bienveillantes !

Enfin, un grand merci à celle qui partage ma vie et qui m'a accompagné pour sa présence, ses encouragements et sa patience.

Résumé

Les modèles de dispersion atmosphérique sont utiles lors d'un accident nucléaire pour aider à la gestion de crise, pour prévoir la dose susceptible d'être reçue par les populations lors du passage du panache des radionucléides rejetés dans l'atmosphère et recommander des actions de protection des populations aux autorités. Cependant, il est indispensable de prendre en compte les incertitudes inhérentes à ces simulations. L'une des sources d'incertitudes les plus influentes est la météorologie utilisée pour alimenter les modèles de dispersion.

Dans la première partie de cette thèse, nous avons utilisé l'ensemble météorologique à fine échelle de Météo-France PEARO, conjointement avec le modèle de dispersion pX développé à l'IRSN, pour intégrer l'incertitude météorologique aux simulations de la dispersion. La qualité des simulations PEARO-pX ainsi construites a été évaluée à l'aide des mesures radiologiques, réalisées par l'IRSN/LRC, de l'activité du ^{85}Kr , radionucléide rejeté par l'usine Orano La Hague lors du procédé de retraitement du combustible nucléaire usé. Les résultats de cette étude mettent en évidence l'apport de l'utilisation des ensembles à haute résolution par rapport à une seule prévision déterministe.

Dans la deuxième partie de thèse, les travaux réalisés portent sur les contraintes liées au temps de calcul, et qui limitent l'utilisation de tous les membres d'un ensemble météorologique en situation d'urgence nucléaire. Pour répondre à cette problématique, l'une des pistes est la réduction du nombre de simulations composant l'ensemble météorologique utilisé en entrée du modèle de dispersion, par la sélection des membres représentatifs (« clustering »). Plusieurs algorithmes d'apprentissage automatique sont utilisés en météorologie pour optimiser les systèmes de prévisions d'ensemble. Dans cette étude, on compare la performance statistique des méthodes de clustering par partition (K-means) et le clustering hiérarchique (Complete-linkage et Ward). Le vent étant l'une des variables météorologiques les plus influentes pour la dispersion atmosphérique, les trois méthodes de clustering sont appliquées aux champs 3D de la vitesse et la direction du vent, afin de classifier les membres météorologiques de la PEARO en sous-groupes (ou clusters) similaires. Ensuite, un indice de représentativité est calculé pour les membres de chaque cluster afin de sélectionner le membre représentatif qui sera utilisé pour le calcul de la dispersion atmosphérique. Les résultats montrent une performance encourageante des algorithmes de clustering, malgré les erreurs liées aux approximations de la mise en œuvre des algorithmes.

Abstract

Atmospheric dispersion models are useful during a nuclear accident to assist in crisis management, to predict the dose likely to be received by the population during the passage of the plume of radionuclides released into the atmosphere and recommend countermeasures to the decision makers. However, it is essential to take into account the uncertainties inherent to these simulations. One of the most influential sources of uncertainties are the meteorological fields fed to the dispersion models.

In the first part of this thesis, we used the Météo-France PEARO fine-scale meteorological ensemble, coupled to the dispersion model pX, developed at IRSN, to integrate meteorological uncertainties into dispersion simulations. The quality of the PEARO-pX simulations thus constructed was evaluated using radiological measurements, carried out by IRSN/LRC, of the air activity concentrations of ^{85}Kr , a radionuclide released by the Orano La Hague plant during the spent nuclear fuel reprocessing process. The results highlight the added value of ensemble forecasts compared to a single deterministic one.

In the second part of the thesis, the study focuses on the computational time constraints that limit the use of all members of a meteorological ensemble in a crisis situation. To address this issue, one of the approaches is to reduce the number of simulations composing the meteorological ensemble used as input to the dispersion model, by selecting representative members ("clustering") who are supposed to represent a large part of the uncertainty of the absolute ensemble. Several Machine Learning algorithms are used in meteorology to optimize ensemble forecasting systems. In this study, we compare the statistical performance of partitioning clustering (K-means) and hierarchical clustering (Complete-linkage and Ward). Since the wind is one of the most sensitive meteorological variables for atmospheric dispersion, the three clustering methods are applied to the wind fields in order to classify the meteorological members of AROME-EPS into similar clusters. Then, a representativeness index is calculated for the members of each cluster to select the representative member to be used for the atmospheric dispersion calculation. The results show an encouraging performance of the clustering algorithms, despite the errors due to the approximations of the implementation of the algorithms.

Table des matières

Remerciements	5
Résumé	6
Abstract	7
Introduction	13
1 La dispersion atmosphérique : mécanismes et outils de modélisation	17
1.1 Généralités	18
1.2 Description de l’atmosphère	19
1.2.1 Structure de l’atmosphère	19
1.2.2 Quelques variables atmosphériques importantes	20
1.2.3 Échelles des mouvements atmosphériques	22
1.3 La turbulence atmosphérique	23
1.3.1 Échelles de la turbulence	23
1.3.2 Origine de la turbulence	24
1.3.3 Impact de la turbulence sur la dispersion atmosphérique	26
1.4 La couche limite et la stabilité atmosphérique	27
1.4.1 Phénoménologie de la couche limite	27
1.4.2 Stabilité atmosphérique et conditions météorologiques	28
1.4.3 Conditions d’inversion de température	29
1.5 Mécanismes de transport des polluants dans la CLA	30
1.5.1 L’advection	30
1.5.2 La diffusion	31
1.6 Sources des radionucléides dans l’atmosphère	32
1.7 Mécanismes de perte des radionucléides	33
1.7.1 Dépôt au sol	33
1.7.2 Désintégration radioactive	34
1.8 Modélisation de la dispersion atmosphérique	36
1.8.1 Équation d’advection-diffusion	36

1.8.2	Les modèles numériques de la dispersion atmosphérique	38
1.8.3	Les modèles gaussiens à bouffées	41
1.9	Modélisation et prévision météorologique	45
1.9.1	La Prévision Numérique du Temps (PNT)	46
1.9.2	Sources d'incertitude dans les prévisions	48
1.9.3	Estimation de l'état initial par assimilation de données	48
1.9.4	Limitations de la modélisation déterministe	50
1.9.5	Vers l'estimation des incertitudes : prévision d'ensemble	51
1.10	Objectif, problématique et plan de la thèse	53
2	Contexte expérimental et outils	55
2.1	Zone d'étude	56
2.1.1	Le site expérimental de La Hague	56
2.1.2	Domaine de calcul de la dispersion atmosphérique	58
2.2	Description des campagnes expérimentales	59
2.2.1	Généralités sur le ^{85}Kr	59
2.2.2	Terme source du ^{85}Kr	63
2.2.3	Observations météorologiques	66
2.2.4	Mesures expérimentales du ^{85}Kr : le projet DISKRYNOC	69
2.2.5	Périodes d'étude	73
2.3	Le modèle déterministe AROME et la Prévision d'Ensemble AROME (PEARO) 74	
2.3.1	Le modèle AROME	74
2.3.2	Le système de Prévision d'Ensemble AROME (PEARO)	75
2.3.3	La version utilisée de la PEARO	76
2.3.4	Dernière version de la PEARO (version non utilisée)	78
2.4	Le modèle pX et ses applications	79
2.4.1	Généralités	79
2.4.2	Interaction avec le sol et le sommet de la CLA	80
2.4.3	Modèle d'advection	84
2.4.4	Modèle de diffusion	85
2.4.5	Reconstruction du panache	85
2.5	Évaluation des ensembles météorologiques et construction des prévisions « sans couture »	87
2.5.1	Scores d'évaluation	87
2.5.2	Significativité des scores : test statistique de Wilcoxon	90
2.5.3	Construction des ensembles météorologiques sans couture	91
2.6	Réduction des ensembles météorologiques par « clustering »	94
2.6.1	Contexte et objectif du clustering	94

2.6.2	Ingrédients du clustering	94
2.6.3	Algorithmes de clustering	96
2.7	Synthèse	99
3	Mise en place et évaluation d'un système de prévision probabiliste de la dispersion des polluants à courte distance	103
3.1	Résumé de l'article	104
3.2	Article : Combining short range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles : probabilistic indicators and evaluation during a ⁸⁵ Kr field campaign	106
4	Étude complémentaire de la chaîne de modélisation probabiliste de la dispersion atmosphérique PEARO-pX	131
4.1	Impact de la hauteur de la couche limite atmosphérique	132
4.2	Évaluation statistique des simulations de Doury	132
4.3	Continuité temporelle des ensembles météorologiques et prévisions « sans couture »	135
4.3.1	Continuité temporelle des membres PEARO	137
4.3.2	Prévisions météorologiques sans couture	140
4.4	Résumé des principaux résultats	142
5	Clustering et sélection des scénarios météorologiques pertinents pour la dispersion à courte distance en cas d'accidents nucléaires	145
5.1	Problématique	146
5.2	Configuration du clustering	147
5.2.1	Algorithmes du clustering	147
5.2.2	Mesure de similarité entre les membres PEARO	147
5.2.3	Variable prédictive	148
5.2.4	Réduction de dimension	149
5.2.5	Estimation du nombre de clusters optimal	150
5.2.6	Membre représentatif de chaque cluster	152
5.3	Impact du clustering sur les sous-ensembles météorologiques	156
5.3.1	Diagnostic du spread-skill	156
5.3.2	Diagnostic du CRPS	158
5.4	Cartes de décision : un outil stratégique pour la gestion des crises nucléaires	158
5.4.1	Création des cartes de décision	158
5.4.2	Stratégie d'évaluation des cartes de décision	160
5.5	Évaluation des cartes de décision	161

5.5.1	Sensibilité à la variable prédictive	162
5.5.2	Sensibilité aux conditions du vent	163
5.6	Évaluation des sous-ensembles de la dispersion par rapport aux observations radiologiques du ^{85}Kr	169
5.7	Résumé des principaux résultats	170
Conclusions et perspectives		173
A Complément de l'évaluation de la PEARO : diagrammes de rangs		179
B Le pré-processeur AROME-to-pX		181
C Article de conférence : HARMO21		183
Table des figures		189
Liste des tableaux		197
Liste des acronymes		199
Bibliographie		203

Introduction

Les rejets accidentels de substances radioactives, ou radionucléides, dans l’atmosphère peuvent avoir des conséquences importantes pour l’environnement et la santé humaine, comme cela a pu être le cas par exemple lors des catastrophes de Tchernobyl ([UNSCEAR et al., 2008](#)) ou de Fukushima ([WHO et al., 2013](#)). Afin d’estimer la dispersion dans l’atmosphère des radionucléides et leur dépôt sur le sol, les végétaux et les bâtiments, les modèles numériques de dispersion atmosphérique sont fréquemment utilisés ([Quélo et al., 2007](#); [Mathieu et al., 2012](#); [Benamrane et al., 2013](#)). Les simulations issues de ces modèles sont utilisées pour aider la prise de décision dans la gestion des situations de crise radiologique. Elles permettent de prévoir les zones où les concentrations de radionucléides pourraient entraîner le dépassement de niveaux d’exposition de la population à la radioactivité au-delà desquels des actions de protection¹ telles que l’évacuation, la mise à l’abri ou la prise d’iode stable sont préconisées. Ainsi, à l’Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), plusieurs modèles de dispersion atmosphérique ont été développés spécifiquement pour l’appui de la prise de décision lors des situations d’urgence radiologique et inclus dans les outils opérationnels du centre technique de crise de l’institut ([Tombette et al., 2014](#)). Parmi ces modèles, on trouve le modèle pX ([Kor-sakissok et al., 2013](#)), utilisé dans la présente thèse, et qui est destiné à la prévision de la dispersion à courte distance de la source et aux distances intermédiaires (de quelques kilomètres jusqu’à quelques dizaines de kilomètres).

Le transport des radionucléides relâchés dans l’atmosphère lors d’un accident dépend fortement des conditions météorologiques. Ces dernières décrivent l’évolution des paramètres de l’écoulement atmosphérique comme le vent, l’humidité ou la température. Ainsi, une bonne prévision de la dispersion atmosphérique nécessite, entre autres, une bonne prévision météorologique en entrée du modèle de dispersion, qui est l’un des paramètres les plus sensibles des simulations de dispersion ([Girard et al., 2014, 2016](#)). Depuis plusieurs décennies, la prévision météorologique a connue d’énormes avancées, grâce aux progrès important des moyens de calcul, des moyens d’observations mais aussi d’une meilleure

1. Les niveaux d’actions de protection lors des situations d’urgences sont définis aux articles R1333-82 et D1333-84 du code de la santé publique en France

connaissance du système atmosphérique (Bauer et al., 2015).

Les incertitudes les plus influentes sur les sorties des modèles de dispersion atmosphérique proviennent des données d'entrée (Le et al., 2021) : la météorologie et le terme source (quantités rejetés au cours du temps). L'information météorologique utilisée pour la prévision de la dispersion est souvent fournie par les prévisions numériques du temps, sous forme de champs physiques 3D ou 4D. En ce qui concerne le terme source, pour une prévision de rejets accidentels potentiels, il peut être défini à partir de la modélisation des processus physiques en jeu dans le réacteur nucléaire ou de la connaissance de l'état de l'installation endommagée. Par ailleurs, dans le cas d'un rejet en cours ou passé, lorsque des observations sont disponibles dans l'environnement, le terme source peut être reconstruit à l'aide des méthodes inverses (Saunier et al., 2013, 2020).

Malgré le développement de modèles météorologiques de plus en plus performants, avec une échelle spatio-temporelle de plus en plus fine, l'incertitude demeure présente dans les prévisions météorologiques. En effet, le système d'équations sur lequel repose la prévision de l'état de l'atmosphère est sensible aux conditions initiales (Lorenz, 1963) et cela peut parfois limiter la capacité des modèles à prévoir avec précision l'évolution des conditions météorologiques. Afin d'estimer cette incertitude, la plupart des services météorologiques dans le monde ont investi dans le développement de systèmes de prévisions d'ensemble. Au contraire de l'approche classique de modélisation déterministe (une unique prévision), l'approche d'ensemble fournit plusieurs prévisions qui représentent une estimation de la distribution de probabilité de l'état de l'atmosphère (Bouttier and Buizza, 2018). Cet ensemble de prévisions permet ainsi de présenter l'information de façon probabiliste en explorant les possibles futures évolutions de l'atmosphère. Par exemple, à Météo-France, le système de prévision d'ensemble AROME (PEARO ; Bouttier et al., 2016) fonctionne en opérationnel depuis 2016, et produit des prévisions probabilistes à échelle kilométrique.

Dans ces travaux de thèse, on souhaite examiner la propagation des incertitudes météorologiques dans les prévisions de la dispersion atmosphérique à courte distance (jusqu'à quelques dizaines de kilomètres de la source). Une démarche classique pour ce faire est d'utiliser les ensembles météorologiques en entrée d'un modèles de dispersion (Straume et al., 1998; Leadbetter et al., 2022; De Meutter and Delcloo, 2022). Pour s'affranchir des incertitudes liées au terme source, l'une des approches les plus privilégiées consiste en l'utilisation d'un terme source réel et connu d'un traceur atmosphérique approprié aux échelles, spatiale et temporelle, considérées (Olesen, 1998; Connan et al., 2011, 2013). Ce terme source est ensuite combiné aux ensembles météorologiques qui sont couplés à un modèle de dispersion atmosphérique (Sørensen et al., 2016; Périllat et al., 2016; El-Quartassy et al., 2022). L'évaluation des prévisions d'ensemble de la dispersion ainsi construites peut être faite par rapport à des mesures radiologiques effectuées dans l'environnement. Dans

ce manuscrit, les mesures continues de l'activité volumique de l'isotope du ^{85}Kr rejeté par l'usine Orano La Hague ont été exploitées dans le cadre de la campagne DISKRYNOC menée par l'IRSN (El-Quartassy et al., 2022).

Ce travail de thèse vise à explorer l'intérêt potentiel de la modélisation d'ensemble dans le cas de la dispersion des radionucléides à l'échelle locale, suite à un rejet accidentel. La propagation des incertitudes météorologiques dans les simulations de dispersion est ainsi caractérisée à travers un cas d'étude combinant un jeu de données original (terme source réel et connu, et observations dans l'environnement récentes et continues) et une méthodologie innovante qui tient compte des contraintes opérationnelles pour l'utilisation des ensembles météorologiques en situation d'urgence radiologique. En pratique, cette méthodologie permet (i) l'évaluation de la performance des ensembles vis-à-vis des observations radiologiques disponibles et (ii) le développement d'algorithmes de sélection automatique des simulations les plus pertinentes, en vue d'améliorer le temps de calcul.

La dispersion atmosphérique : mécanismes et outils de modélisation

Sommaire

1.1	Généralités	18
1.2	Description de l’atmosphère	19
1.3	La turbulence atmosphérique	23
1.4	La couche limite et la stabilité atmosphérique	27
1.5	Mécanismes de transport des polluants dans la CLA	30
1.6	Sources des radionucléides dans l’atmosphère	32
1.7	Mécanismes de perte des radionucléides	33
1.8	Modélisation de la dispersion atmosphérique	36
1.9	Modélisation et prévision météorologique	45
1.10	Objectif, problématique et plan de la thèse	53

Ce chapitre présente les fondements théoriques des principales notions permettant la compréhension de la suite de ce manuscrit. En premier lieu, une description de l’atmosphère est exposée, ainsi que les différents mécanismes gouvernant l’évolution des polluants dans la couche limite atmosphérique : transport, puits, sources et dispersion turbulente. Ensuite, une description générale des modèles de dispersion atmosphérique est présentée. Une attention particulière est alors apportée à la modélisation gaussienne à bouffées, dans la mesure où ce type de modèle est utilisé dans ce travail de thèse. Les principaux aspects de la prévision numérique du temps et l’approche ensembliste de la prévision sont ensuite développés. Finalement, on expose l’objectif principal de la thèse, les questions scientifiques traitées et le plan du manuscrit.

1.1 Généralités

La dispersion atmosphérique caractérise le devenir dans l'espace et dans le temps d'un nuage de polluants (appelé aussi dans la suite « panache » ou « bouffée », selon le contexte) rejeté dans l'atmosphère. Il peut s'agir de rejets d'effluents chimiques par l'industrie, de panaches d'incendies, d'éruptions volcaniques, de polluants diffus issus du trafic routier, ou encore d'origine naturelle (pollens, sables sahariens...). Dans le cas de rejets de substances radioactives (ou radionucléides), il peut s'agir de rejets chroniques faisant l'objet d'autorisations réglementaires, par exemple pour la production de radionucléides pour l'industrie pharmaceutique, ou dans le cadre du cycle du traitement du combustible; ceux-ci sont bien en-deçà des limites pour lesquelles un effet sur la santé ou l'environnement est observé. En ce qui concerne des rejets significatifs de radionucléides conduisant à des dépassements de seuils de référence pour l'exposition des populations, deux accidents majeurs, classés 7 sur l'échelle INES¹ (International Nuclear and Radiological Event Scale), ont eu lieu dans l'histoire du nucléaire civil (Tchernobyl en 1986 et Fukushima en 2011).

Les modèles de dispersion atmosphérique visent à représenter les phénomènes présidant au transport et au dépôt de ces polluants dans l'atmosphère; ces phénomènes sont les mêmes quelle que soit la nature du polluant (radioactif ou non). Seules la décroissance et la filiation radioactives sont propres à ce type de substance. Dans ce dernier cas, les modèles de prévision de la dispersion atmosphérique sont utilisés afin d'estimer l'évolution, dans l'espace et le temps, de la concentration des radionucléides dans l'air ainsi que de la quantité déposée au sol et sur les végétaux et bâtiments. Ces valeurs de concentration dans l'air et de dépôt permettent d'estimer les potentiels effets sur la santé humaine et l'environnement des rejets radioactifs en cas d'incident ou d'accident. Par définition, la concentration dans l'air exprime la quantité transportée d'un polluant par unité de l'air en un point de l'espace, à un instant donné :

$$C(x, y, z, t) = \frac{\text{Quantité du polluant}}{\text{Quantité de l'air}} \quad (1.1)$$

À partir de cette définition, on distingue six types de concentrations selon le cas d'étude : (i) concentration volumique en m^3/m^3 , (ii) concentration massique en kg/kg , (iii) concentration molaire en *ppm* ou *ppb*, généralement utilisée pour les polluants chimiques (iv) masse volumique en kg/m^3 , (v) volume spécifique en m^3/kg ou (vi) activité volumique Bq/m^3 dans le cas des polluants radioactifs, qui est le cas du présent manuscrit.

L'évaluation de la dispersion des polluants dans l'atmosphère nécessite une compréhens-

1. Échelle internationale de gravité d'un incident ou d'un accident dans le domaine de la sûreté nucléaire, de 0 (événement peu important) à 7 (événement majeur).

sion profonde des phénomènes atmosphériques qui gouvernent l'évolution de la concentration de ces polluants. Ainsi, avant d'évoquer les mécanismes intervenant dans la modification de la concentration dans l'air, il nous semble nécessaire de présenter une description générale de l'environnement atmosphérique où ces mécanismes ont lieu.

1.2 Description de l'atmosphère

1.2.1 Structure de l'atmosphère

L'atmosphère est la couche gazeuse qui enveloppe notre planète avec une épaisseur de quelques centaines de kilomètres. Sous l'effet du champ de gravité terrestre, l'air atmosphérique est stratifié pour composer cinq couches caractérisées par leur composition chimique et leur température (Figure 1.1) :

- *Troposphère* [0–15 km] : elle est caractérisée par une forte diminution de la température avec l'altitude, et le réchauffement de cette couche a pour origine l'absorption du rayonnement visible et infrarouge provenant du soleil. D'une épaisseur variant entre environ 15 km au-dessus de l'équateur à 8 km au-dessus des pôles, la troposphère est la couche de l'atmosphère où se produisent la plupart des phénomènes météorologiques, ainsi que les mouvements horizontaux et verticaux (vents et convection thermique). De plus, cette couche contient environ 90 % de la masse totale d'air atmosphérique et la quasi-totalité de la vapeur d'eau.
- *Stratosphère* [15–50 km] : dans cette couche, la température augmente avec l'altitude jusqu'à environ de 0 °C, sous l'effet de l'absorption du rayonnement solaire ultra-violet par la couche d'Ozone qu'elle contient. La densité de l'air y est environ 5 à 10 fois moindre que dans la troposphère.
- *Mésosphère* [50–85 km] : dans cette couche, la température décroît à nouveau avec l'altitude jusqu'à environ –80 °C. L'air y devient extrêmement ténu : 1000 fois moins dense que dans la troposphère.
- *Thermosphère* [à partir de 85 km] : elle se caractérise par une augmentation de la température avec l'altitude, et une perte de masse progressive jusqu'au vide spatial.

La troposphère est la couche où l'essentiel des activités biologiques terrestres et des activités humaines se concentre. D'un point de vue mécanique, la troposphère peut être séparée en deux parties :

- Une première zone, dite *troposphère libre*, où les effets de la surface sont négligeables, et la force de Coriolis, due à la rotation de la Terre sur elle-même, est prédominante. Dans cette zone, le vent est déterminé par l'écoulement synoptique à l'échelle de la planète.

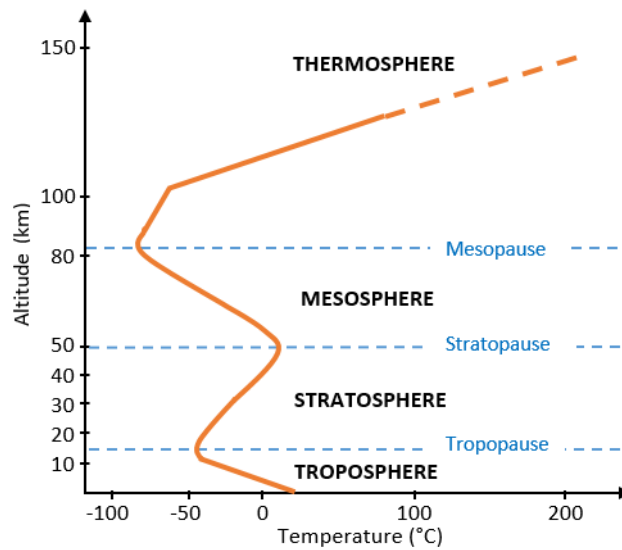


FIGURE 1.1 – Profil vertical de la température dans les différentes couches de l’atmosphère. Inspiré de Vendel (2011).

- Une deuxième zone au voisinage du sol où l’effet de l’interaction avec la surface devient prépondérant par rapport à la force de Coriolis. Cette zone est appelée la *Couche Limite Atmosphérique* (appelée dans la suite CLA ou simplement « couche limite »). L’épaisseur caractéristique de la CLA est de quelques centaines de mètres (de quelques dizaines de mètres, la nuit, à quelques kilomètres en pleine journée).

1.2.2 Quelques variables atmosphériques importantes

L’atmosphère est caractérisée par plusieurs grandeurs physiques. Dans ce paragraphe, on propose une liste non-exhaustive de ces grandeurs.

La pression (P). En météorologie, la pression (exprimée en hectopascal, hPa) est la force du poids de l’air exercée à une altitude donnée. Pour comparer des pressions entre elles, la pression au niveau de la mer (notée P_{mer}) est souvent utilisée comme référence, et elle égale en moyenne sur le globe 1013 hPa. Des valeurs inférieures à la P_{mer} (respectivement supérieures à la P_{mer}) indiquent des conditions dépressionnaires (respectivement les conditions anticycloniques). En outre, les niveaux de pression atmosphérique sont fréquemment employés en météorologie pour étudier l’atmosphère à différents niveaux verticaux.

Le vent (u, v, w). Il fait partie des variables atmosphériques les plus cruciales pour la dispersion des polluants atmosphériques : les mouvements atmosphériques s’organisent sous l’effet du vent, avec ses trois composantes u (suivant la direction Ouest-Est), v (sui-

vant la direction Sud-Nord) et w (pour les mouvements verticaux). Le vent traduit le déplacement des masses d'air qui s'échappent des zones de haute pression (anticyclones) vers les zones de basses pressions (dépressions), et se définit généralement par sa vitesse (exprimée en m.s^{-1} ou en km.h^{-1}) et sa direction qui est un angle, variant entre 0° (pour le vent venant du Nord) et 360° , dérivé des composantes horizontales. Pour caractériser la variabilité spatiale du vent, les météorologues définissent, entre autres, le *vent moyen* qui est un vent moyenné sur 10 min, et la *rafale* qui est un vent généralement moyenné sur 1 min.

La température (T). Mesurée dans le système international en Kelvin elle est, en pratique, plutôt exprimée en degrés Celsius ($^\circ\text{C}$). La température est répartie sur le globe de façon non homogène à cause du gradient du rayonnement solaire entre l'équateur et les pôles, ainsi que les interactions du rayonnement avec l'atmosphère et la surface (phénomènes d'absorption et de réflexion). Le gradient vertical de température est un bon marqueur pour caractériser les limites entre les différentes couches de l'atmosphère (Figure 1.1).

La température potentielle (θ). C'est la température qu'aurait une parcelle d'air (initialement à la température T) une fois ramenée, de façon adiabatique, d'une pression P à la pression de référence $P_0 \simeq 1000\text{hPa}$:

$$\theta = T \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-R/C_p} \quad (1.2)$$

Où R est la constante des gaz parfaits ($287 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$), et C_p la chaleur massique à pression constante pour l'air sec ($1005 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$).

Le cumul de pluie (RR). Si le vent est le facteur principal du transport des polluants dans l'atmosphère, la pluie représente le facteur principal de leur dépôt au sol (sauf dans le cas des polluants chimiquement inertes tels que les gaz nobles). Le cumul de pluie (exprimé en millimètre, mm) est la quantité des précipitations tombée sur un intervalle de temps donné, avec 1 mm qui correspond environ à 1L par mètre carré. Pour estimer au mieux ce paramètre, les mesures par pluviomètres peuvent être combinées aux acquisitions par radars pour obtenir ce qu'on appelle des produits de fusion, comme l'ANalyse par spaTialisation hOraire des PrEcipitations (ANTILOPE) de Météo-France (Laurantin, 2013).

Échelle	Taille caractéristique	Durée caractéristique	Phénomènes atmosphériques
Synoptique	$\sim 10^4$ km	Quelques jours	Vent géostrophique
Méso-échelle	1 – 100 km	\sim jour	Mouvements thermiques ascendants
Micro-échelle	<1 km	\sim minute	Turbulence, rafales

TABLE 1.1 – Échelles caractéristiques des mouvements atmosphériques.

1.2.3 Échelles des mouvements atmosphériques

Le transport des polluants dans l’atmosphère dépend en premier lieu des conditions météorologiques, en particulier le vent et la convection. En météorologie, les phénomènes atmosphériques sont divisés en plusieurs catégories selon leur taille caractéristique (Orlanski, 1975) et leur durée de vie. Pour caractériser ces phénomènes, on distingue généralement trois échelles principales (Tableau 1.1) :

- *Échelle synoptique* : les mouvements synoptiques correspondent aux échelles de l’ordre du millier de kilomètre, avec des durées de vie allant de quelques jours à la semaine. Ces mouvements sont responsables du transport des polluants atmosphérique à l’échelle intercontinentale. À titre d’exemple, le gradient thermique, dû à la différence importante du rayonnement solaire reçu par les zones équatoriales et les zones polaires, produit des zones des vents forts dans la troposphère libre, sous la tropopause, appelés courants jet.
- *Méso-échelle* : elle regroupe l’ensemble des phénomènes atmosphériques de l’ordre de 1 km à 100 km, avec des durées de vie allant d’une heure à un jour. Cette échelle est celle des phénomènes convectifs (Siméon, 2006), comme les tornades et les orages , ainsi que les mouvements thermiques ascendants.
- *Micro-échelle* : elle regroupe les phénomènes de taille inférieure à 1 km, et des durées de vie de l’ordre de la minute. Dans cette catégorie on trouve, par exemple, les rafales du vent et les tourbillons de poussière. Cette échelle est principalement celle de la turbulence dans la CLA.

Au final, la méso-échelle et la micro-échelle correspondent aux phénomènes atmosphériques prépondérants dans la dispersion des polluants radioactifs aux échelles spatiales considérées dans le présent manuscrit.

1.3 La turbulence atmosphérique

1.3.1 Échelles de la turbulence

Les mouvements de l'air entraînés par le vent dans l'atmosphère peuvent être vus physiquement comme un écoulement d'un fluide visqueux (l'air) de vitesse U_I (vitesse du vent) variant sur une échelle spatiale ℓ_I , cette dernière étant une caractéristique des tourbillons de grande échelle (appelée *échelle intégrale*). Ces mouvements sont naturellement considérés comme des écoulements subsoniques² et sont décrits en mécanique des fluides par les équations de *Navier-Stokes* incompressibles :

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p + \nu \Delta \vec{U} \\ \operatorname{div} \vec{U} = 0 \end{cases} \quad (1.3)$$

Avec ρ , p et ν qui représentent, respectivement, la densité, la pression et la viscosité cinématique de l'air.

En outre, un écoulement visqueux est caractérisé par son nombre de *Reynolds*, qui permet de mesurer l'importance des effets inertiels $(\vec{U} \cdot \nabla) \vec{U}$ par rapport aux effets visqueux $\nu \Delta \vec{U}$:

$$Re = \frac{U_I \cdot \ell_I}{\nu} \quad (1.4)$$

En effet, le mouvement turbulent de l'air est maintenu sous l'effet du vent moyen qui lui communique constamment de l'énergie, sous forme d'énergie cinétique. Cette énergie, est ensuite dissipée par les termes visqueux de l'équation de Navier-Stokes sous forme de chaleur. Cependant, cette dissipation est très faible à l'échelle ℓ_I et se transfère vers les échelles plus petites lorsque les grands tourbillons se transforment en tourbillons plus petits. Ce processus, connu sous le nom de la *cascade de Richardson*, s'arrête quand des échelles suffisamment petites pour que l'énergie y soit dissipée sous forme de chaleur sont atteintes. À ces échelles, appelées *échelles de Kolmogorov* (notée ℓ_η), la dissipation de l'énergie est effectuée par la diffusion moléculaire (Kolmogorov, 1991). La cascade de Richardson, contribuant au mélange des polluants dans l'atmosphère, a été décrite théoriquement pour la première fois par Richardson, et vérifiée pour les écoulements atmosphériques par Lumley and Panofsky (1964).

On note ϵ_k le taux de dissipation de l'énergie par unité de masse et de temps (appelée aussi taux de cascade). Par analyse dimensionnelle, on montre que :

2. C'est à dire que la vitesse d'écoulement est très inférieure à la vitesse du son.

$$\epsilon_k \simeq \frac{U_I^3}{\ell_I} \quad (1.5)$$

La loi d'échelle $U(\ell)$, telle que $\ell_\eta < \ell < \ell_I$, s'écrit de la façon suivante :

$$U(\ell) \simeq (\epsilon_k \ell)^{1/3} \quad (1.6)$$

À partir de (1.5) et (1.6), on obtient la loi d'échelle $U(\ell)$ en fonction des caractéristiques de l'écoulement à l'échelle intégrale (U_I et ℓ_I) :

$$U(\ell) = U_I \left(\frac{\ell}{\ell_I} \right)^{1/3} \quad (1.7)$$

Aux échelles de Kolmogorov, la vitesse de l'écoulement turbulent U_η est déterminée uniquement par la viscosité cinématique ν et le taux de dissipation de l'énergie ϵ_k :

$$U_\eta \simeq \nu^{1/4} \epsilon_k^{1/4} \quad (1.8)$$

De plus, aux échelles ℓ_η , la dissipation visqueuse se produit telle que $Re_\eta \simeq 1$. On en déduit alors l'expression de l'échelle de Kolmogorov en fonction de ν et ϵ_k :

$$\ell_\eta \simeq \nu^{3/4} \epsilon_k^{-1/4} \quad (1.9)$$

Cette analyse, dite de Kolmogorov, donne une estimation du ratio entre l'échelle spatiale représentative des grandes échelles ℓ_I , et la longueur de Kolmogorov ℓ_η , représentative des petites échelles. À partir de (1.4), (1.5) et (1.9) on obtient :

$$\frac{\ell_I}{\ell_\eta} \simeq Re^{3/4} \quad (1.10)$$

En prenant les valeurs typiques de la vitesse du vent dans la couche limite $U_I = 10 \text{ m.s}^{-1}$ et de la viscosité cinématique de l'air atmosphérique $\nu \simeq 10^{-5} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, on obtient un nombre de Reynolds $Re \simeq 10^9$, ce qui prouve que l'écoulement est fortement turbulent dans la CLA. Dans un tel milieu, le ratio de deux échelles différentes, donné par l'équation 1.10, est très grand (de l'ordre de 10^6), ce qui veut dire qu'un modèle ne peut être capable de représenter simultanément l'ensemble des échelles spatiales. Ainsi, l'échelle de la turbulence prise en compte par un modèle définit son échelle représentative.

1.3.2 Origine de la turbulence

À petite et moyenne échelles, le phénomène de turbulence atmosphérique est incontournable à comprendre et à prendre en considération dans la modélisation de la dispersion



FIGURE 1.2 – Représentation schématique de la turbulence d’origine mécanique : la modification de la trajectoire du vent (\vec{U}) par un obstacle, et la création d’une zone de turbulence mécanique.

atmosphérique à l’intérieur de la CLA. Dans ce milieu, les phénomènes de turbulence ont deux origines principales : *mécanique* et *thermique*.

Turbulence d’origine mécanique

À mesure que l’on s’approche de la surface, l’écoulement atmosphérique rencontre des obstacles (e.g bâtiments, orographie, etc.) qui perturbent la trajectoire du vent en modifiant les caractéristiques moyennes de l’écoulement, et donnent ainsi naissance à des zones de turbulence dite d’origine mécanique (Figure 1.2). De plus, la turbulence mécanique peut provenir aussi d’un gradient de vitesse du vent, impliqué par la présence d’une paroi (le sol), donc de la turbulence liée au frottement entre les masses d’air de différentes vitesses. D’où l’importance de la turbulence d’origine mécanique dans les situations des vents forts.

Turbulence d’origine thermique

Par chauffage du sol sous l’effet du rayonnement solaire incident, les masses d’air se trouvant au voisinage du sol se réchauffent par conduction. Par conséquent, le phénomène de convection se produit : les parcelles d’air chaud (moins denses) montent jusqu’à une certaine hauteur où elles perdent une grande partie de leur énergie par refroidissement (équilibre thermique) puis redescendent et se réchauffent de nouveau. Ces mouvements d’ascendance-descendance de l’air créent des zones turbulentes, dite d’origine thermique ou convective (Figure 1.3).

On note que la turbulence thermique est beaucoup plus importante le jour et en conditions de ciel dégagé. De plus, cette turbulence est souvent à l’origine de la création des nuages, et même de cellules orageuses, quand elle est importante (Avisar and Liu, 1996).

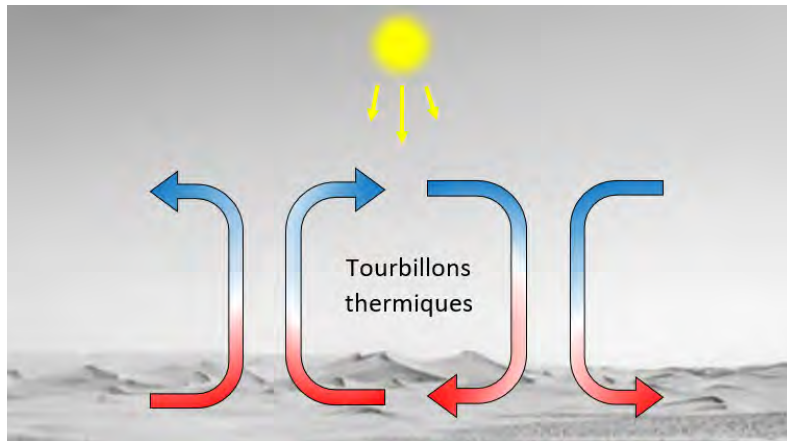


FIGURE 1.3 – Représentation schématique de la turbulence d’origine thermique, et la création des gros tourbillons thermiques. Les masses d’air chaud au voisinage du sol sont représentées par la couleur rouge, alors que les masses d’air froid en altitude sont représentées par la couleur bleue.

1.3.3 Impact de la turbulence sur la dispersion atmosphérique

L’impact de la turbulence sur la dispersion des polluants dépendra fortement de son échelle, ou plus concrètement de la taille des tourbillons par rapport à la bouffée de polluants. Pour visualiser cet impact, on considère l’image physique d’une bouffée rejetée dans l’atmosphère par une source ponctuelle. On distingue trois cas (Figure 1.4) :

- La taille des tourbillons est beaucoup plus petite que celle de la bouffée : dans ce cas, les tourbillons entraînent progressivement l’air à l’intérieur de la bouffée, ce qui produit la dilution de la bouffée et sa diffusion de façon uniforme.
- La taille des tourbillons est beaucoup plus grande que celle de la bouffée : dans ce cas, les tourbillons voient la bouffée comme une particule d’air, et la transportent par l’écoulement sans la diffuser.
- La taille des tourbillons est comparable à celle de la bouffée : dans ce cas, la bouffée est déformée sous l’effet de la turbulence non homogène. L’efficacité du mélange est plus importante que dans les deux cas précédents.

En résumé, un panache est toujours dispersé dans l’atmosphère, car il existe toujours des tourbillons de taille moindre que celle du panache. Cependant, l’efficacité du mélange dépend à la fois de l’échelle dominante de la turbulence et de la taille de la bouffée qui augmente en s’éloignant de la source.

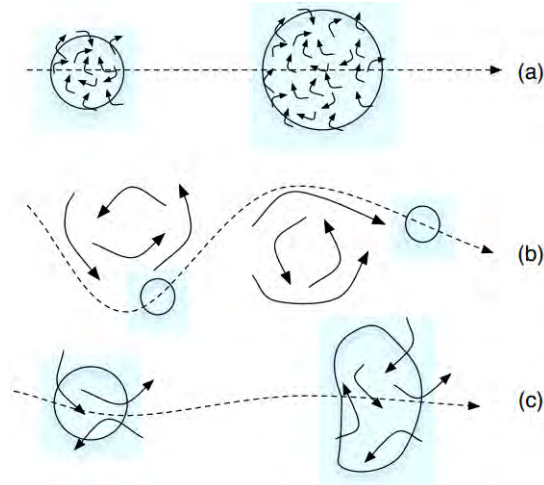


FIGURE 1.4 – Dispersion d’une bouffée transportée par l’air dans trois conditions de turbulence : (a) taille des tourbillons plus petite que celle de la bouffée, (b) taille des tourbillons plus grande que celle de la bouffée (c) taille des tourbillons et celle de la bouffée comparables. Source : Seinfeld and Pandis (1998).

1.4 La couche limite et la stabilité atmosphérique

1.4.1 Phénoménologie de la couche limite

Comme nous l’avons abordé précédemment, la couche limite correspond à la zone de l’atmosphère dans laquelle l’influence de l’intensité de la force de Coriolis s’amointrit en s’approchant de la surface en faveur des forces de frottement liées à l’interaction de l’écoulement avec le sol. C’est la couche qui est soumise aux échanges (thermiques et mécaniques) avec le sol, et qui subit les influences de la surface sur des échelles de temps de l’ordre de l’heure (Stull, 1988). La couche limite peut être divisée en deux couches, présentées sur la Figure 1.5–a : (i) une couche supérieure appelée « couche d’Ekman » où la direction du vent tourne avec la hauteur sous l’effet de la force de Coriolis, et (ii) une couche plus proche du sol, dite « couche de surface », où les flux turbulents, les flux de quantité de mouvements et les flux de chaleur sensible et latente sont conservatifs et égaux à ceux du sol. D’une manière assez générale, la couche de surface représente environ 10% de la couche limite.

Le sommet de la couche limite (appelé dans la suite « hauteur de la couche limite » ou simplement HCL) varie typiquement entre environ 100 et 2000 m selon l’heure de la journée (Figure 1.5–b). Pendant le jour, la HCL est maximale du fait de la turbulence d’origine thermique et se compose d’une « couche de mélange » par turbulence. Pendant la nuit, elle est minimale et se compose d’une couche nocturne stable (couche de surface) sous l’effet du refroidissement par conduction en contact avec le sol. Les polluants émis dans la journée précédente et déjà mélangés sur la verticale restent en grande partie

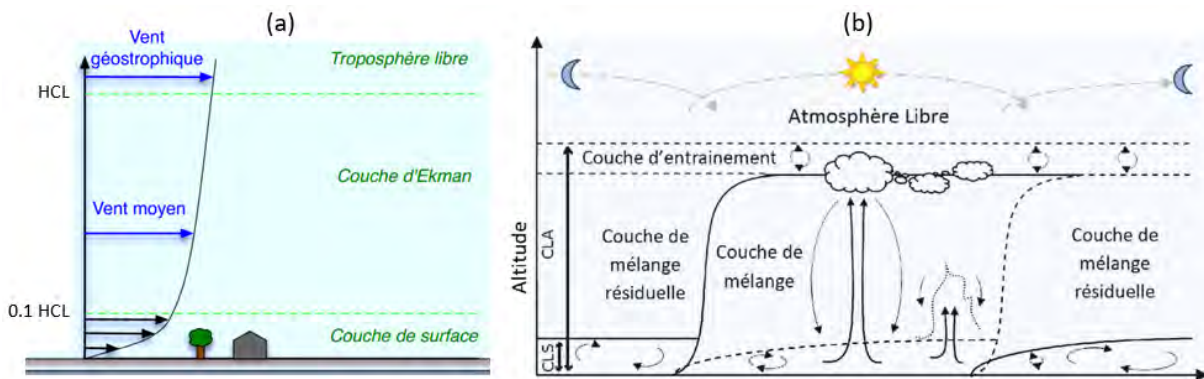


FIGURE 1.5 – (a) : Représentation de la couche limite qui se compose de la couche d'Ekman et la couche de surface (Source : Korsakissok, 2009). (b) : Évolution de la couche limite au cours d'une journée, et la mise en place des phénomènes de turbulence. La hauteur de la couche limite est maximale le jour et minimale la nuit (Source Aumond, 2011).

piégés au-dessus de cette couche nocturne, dans une « couche de mélange résiduelle » peu turbulente, de hauteur égale à celle de la couche limite du jour précédent.

1.4.2 Stabilité atmosphérique et conditions météorologiques

Étant donné que le vent vertical est généralement très faible devant le vent horizontal, le transport vertical des polluants est principalement turbulent, et lié notamment aux tourbillons thermiques entraînés par le réchauffement du sol par la rayonnement solaire.

La turbulence atmosphérique est souvent associée à la notion de la *stabilité atmosphérique*, qui est conditionnée par le gradient vertical de température de l'atmosphère par rapport au gradient *adiabatique*³ ($\Gamma_{ad} \simeq 0.98 \text{ }^\circ\text{C}/100 \text{ m}$), comme le montre la Figure 1.6.

Dans le cas d'une atmosphère **stable**, le gradient de température de l'atmosphère est supérieur au gradient adiabatique, et par conséquent l'air en altitude est plus chaud qu'au voisinage du sol, et donc la couche la plus basse de l'atmosphère où sont émis les polluants aura tendance à rester près du sol. Dans ce cas, la stratification thermique détruit la turbulence thermique, et les seuls tourbillons créés sont d'origine mécanique (cisaillement de vent près du sol), et ainsi le mélange vertical est très peu efficace. Ces conditions sont fréquentes la nuit, quand le ciel est clair avec des conditions du vent faible. Inversement, l'atmosphère est **instable** lorsque le gradient de température de l'atmosphère est inférieur au gradient adiabatique. Dans ce cas, l'air est plus chaud au voisinage du sol qu'en altitude, ce qui crée des gros tourbillons d'origine thermique. Un nuage de polluants émis au niveau

3. Déplacement vertical d'un volume élémentaire d'air sans échanges d'énergie (chaleur) avec le milieu extérieur.

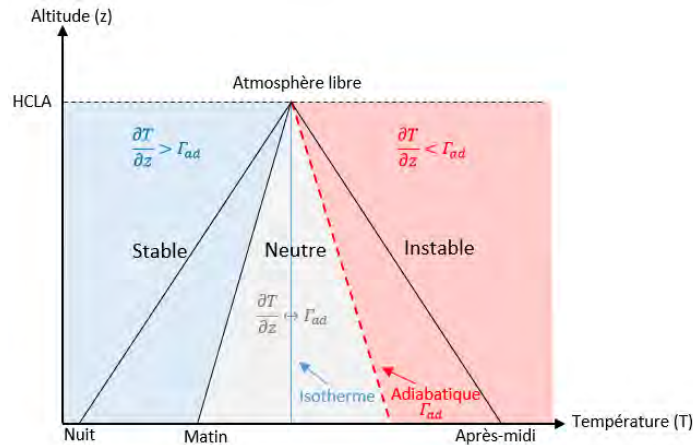


FIGURE 1.6 – Les conditions de stabilité atmosphérique, selon le gradient vertical de température. Inspiré du schéma de Hadjira Schmitt-Foudhil, École des Ponts ParisTech, 2010.

du sol aura donc tendance à s'élever en se dispersant rapidement (mélange vertical très efficace). Ces situations sont fréquentes dans le cas de rayonnement solaire intense (le jour) et de vent faible. La limite entre les conditions stables et instables est appelé atmosphère **neutre**. Dans ce cas, le gradient de température de l'atmosphère tend vers le gradient adiabatique. Le mélange vertical dû à la turbulence d'origine mécanique est assez efficace, et le panache a alors une forme de cône. Cette situation peut se produire aussi dans le cas d'un faible gradient de température (atmosphère isotherme). C'est le cas des situations avec une couverture nuageuse importante et du vent fort (généralement en début de matinée).

1.4.3 Conditions d'inversion de température

Les conditions d'inversion de température ont lieu lorsque le gradient de température s'inverse à une certaine hauteur, et que l'air devient plus chaud avec l'altitude (l'état le plus stable de l'atmosphère). On appelle la couche où ce phénomène se produit « couche d'inversion », et en pratique il existe deux cas d'inversion :

- En début de nuit, à mesure que le sol se refroidit par émission du rayonnement infrarouge, il devient plus froid que l'air ambiant. L'atmosphère est donc stable près du sol et instable plus haut en altitude (dans la couche de mélange résiduelle).
- En journée, à mesure que le sol se réchauffe par le rayonnement solaire, il devient plus chaud que les couches d'air adjacentes. Une inversion de température peut se produire plus en altitude du fait des conditions rencontrées pendant la nuit précédente. L'atmosphère est donc instable ou neutre entre le sol est la hauteur d'inversion, et stable au-delà.

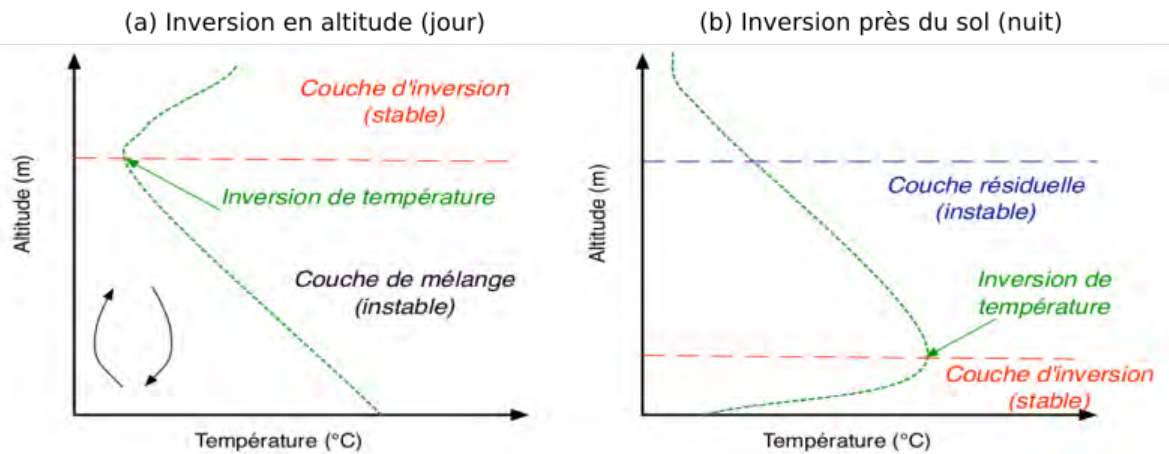


FIGURE 1.7 – Représentation du phénomène de l'inversion de température en altitude dans la journée (a) et près du sol dans la nuit (b). Source : [Korsakissok \(2009\)](#).

On note que dans les deux cas, il n'y a pratiquement pas d'échanges entre la surface et la partie de l'atmosphère située au-dessus de la hauteur d'inversion. Ainsi, d'un point de vue général, on considère que lorsqu'il y a inversion, la hauteur de la couche limite est la hauteur d'inversion.

1.5 Mécanismes de transport des polluants dans la CLA

Le transport d'un nuage de polluants dans l'atmosphère se caractérise par la coexistence de deux mécanismes principaux : *l'advection* et *la diffusion*. Les écoulements dans la CLA étant extrêmement turbulents, les mouvements de l'air s'y effectuent sous forme de tourbillons d'échelles spatiales et temporelles différentes. Ces tourbillons sont le facteur principal de la dispersion verticale des polluants dans la CLA.

1.5.1 L'advection

L'advection d'une bouffée présente dans l'atmosphère correspond au déplacement horizontal de son centre de gravité sous l'effet du vent (vitesse et direction). De plus, au cours du transport de la bouffée, l'advection conserve sa concentration et son volume. En revanche, sa forme peut être conservée ou changée selon le régime de l'écoulement, comme le montre la Figure 1.8. Dans le premier cas, la vitesse est uniforme dans l'écoulement, alors la bouffée subit une translation horizontale tout en gardant sa forme. Le deuxième cas correspond au rejet d'un nuage de polluant au voisinage d'une paroi. Dans ce cas, le gradient de vitesse conduit à un déplacement de certaines parties de la bouffée plus

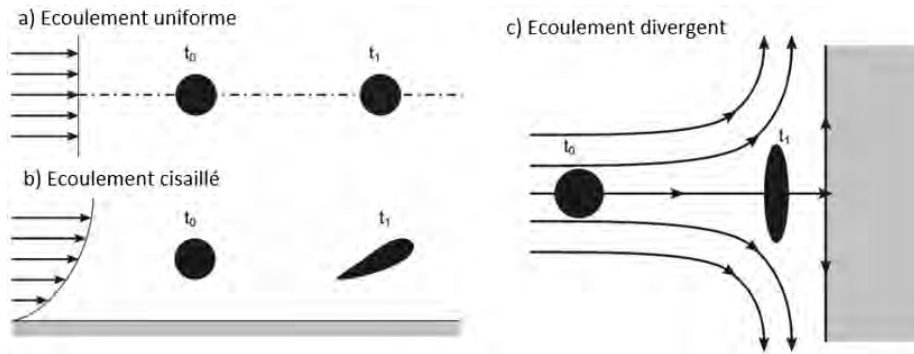


FIGURE 1.8 – Advection d'un nuage de polluant en fonction du type d'écoulement entre deux instants t_0 et t_1 (avec $t_0 < t_1$). (a) : Écoulement uniforme. (b) : Écoulement cisailé (couche limite). (c) : Écoulement divergent au voisinage d'une paroi. Source : Perkins et al. (2005).

rapidement que d'autres, et par conséquent la bouffée se déplace en se déformant. C'est le cas des situations de cisaillement du vent dans la couche limite. Le troisième régime d'écoulement est rencontré lors de l'existence d'un obstacle qui fait diverger les lignes de courant de l'écoulement, ce qui conduit à un étirement de la bouffée dans la direction transversale.

1.5.2 La diffusion

La diffusion, quant à elle, correspond à un étalement du nuage de polluant, traduit par le déplacement relatif de ses volumes élémentaires par rapport à son centre de gravité. On distingue deux types de diffusion : (i) la diffusion moléculaire, qui représente un mécanisme de transport à l'échelle microscopique, et (ii) la diffusion turbulente, qui est le facteur principal de la diffusion à l'échelle macroscopique.

Au regard de la grande échelle spatiale caractérisant la diffusion turbulente à l'intérieur de la CLA, la diffusion moléculaire est généralement considérée négligeable par rapport à la diffusion turbulente. Cependant, combinée à la diffusion turbulente, la diffusion moléculaire contribue à l'efficacité du mélange. Le mouvement brownien⁴ des radionucléides à l'échelle microscopique conduit à un flux à l'échelle macroscopique, exprimé à partir de la loi de diffusion de Fick. Cette loi suppose une relation linéaire entre le flux massique de matière J (en $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-2}$) et le gradient de concentration ∇c , où c est une concentration massique (en kg.m^{-3}) :

$$J = -D\nabla c \quad (1.11)$$

4. C'est à dire le mouvement aléatoire et spontané des « grosses » particules des radionucléides, qui ne sont soumises qu'à l'interaction des chocs avec les « petites » molécules de l'air environnant.

Avec D le coefficient de diffusivité moléculaire qui dépend de l'espèce transportée.

Au contraire de l'advection, la diffusion ne conserve pas la concentration à l'intérieur de la bouffée, mais elle conduit à la dilution des polluants dans l'air, et par conséquent à l'augmentation de la taille de la bouffée au cours du temps. De plus, l'advection est un processus réversible alors que la diffusion est un processus à caractère irréversible.

1.6 Sources des radionucléides dans l'atmosphère

D'un point de vue général, les polluants participant à la qualité de l'air sont distinguées en deux familles : (i) les *polluants primaires* qui sont directement émis dans l'atmosphère (qu'il s'agisse de polluants d'origine naturelle ou anthropique), et (ii) les *polluants secondaires* qui sont produits dans l'atmosphère suite à des transformations physico-chimiques d'autres éléments (par exemple l'ozone). Cependant, dans ce paragraphe on s'intéresse particulièrement à la pollution atmosphérique par les émissions radioactives. Dans ce cas, il existe principalement deux types d'émissions :

- *Émissions naturelles*, provenant de sources naturelles, tels que les radionucléides cosmogéniques (tritium, carbone-14, krypton-85, béryllium-7 et sodium-22) qui sont créés en permanence dans la haute atmosphère sous l'effet du rayonnement cosmique. Un autre exemple de radionucléides d'origine naturelle est le Radon-222 contenu dans certains types des roches, notamment le granit, et qui peut être transféré vers l'atmosphère sous forme de gaz (Quérel et al., 2022).
- *Émissions anthropiques*, dues à l'activité humaine. Par exemple, les émissions industrielles, tel que le rejet du krypton-85 lors du recyclage des combustibles nucléaires usés (Connan et al., 2013, 2014), ou encore les émissions liées au processus de fabrication d'isotopes à usage médical (De Meutter et al., 2016). Ces sources de radioactivité sont parfaitement connues et contrôlées, soumises à des autorisations réglementaires. Les rejets radioactifs suite aux accidents nucléaires majeurs tels que l'accident de Fukushima (Mathieu et al., 2012; Korsakissok et al., 2013) ou l'accident de Tchernobyl (Davoine and Bocquet, 2007) sont beaucoup plus importants mais aussi plus difficiles à évaluer précisément. Des détections de radionucléides dans l'atmosphère anormales beaucoup plus faibles peuvent se produire, liées à des anomalies mineures ou des rejets autorisés combinées à des conditions météorologiques particulièrement propices à la stagnation des polluants; dans ce cas, les modèles de dispersion atmosphérique sont utilisés, conjointement avec les prévisions météorologiques, pour déterminer l'origine des rejets (Saunier et al., 2019; Tomas et al., 2021) .

1.7 Mécanismes de perte des radionucléides

Les radionucléides rejetés peuvent être éliminés de l'atmosphère par deux mécanismes de perte principaux : (i) le dépôt au sol et (ii) la désintégration radioactive. Le premier mécanisme est commun à tous les types de polluants atmosphériques, tandis que le second est propre aux radionucléides. Si le radionucléide en question est chimiquement inerte (gaz noble ou rare), la contribution du dépôt est généralement considérée comme négligeable. La perte par décroissance radioactive peut être aussi négligée dans le cas de la dispersion à courte distance d'un radionucléide ayant une période radioactive suffisamment longue. Ces deux cas constituent le cadre de ces travaux de thèse : dispersion à courte distance d'un radionucléide inerte. Toutefois, il est utile de dire quelques mots sur les mécanismes de perte, dans la mesure où cela permettra d'aborder certaines notions intéressantes pour la compréhension de la suite du manuscrit.

1.7.1 Dépôt au sol

Dépôt sec

Le dépôt sec regroupe l'ensemble des processus produisant le transfert des particules radioactives de l'atmosphère vers le sol, soit par sédimentation gravitationnelle ou bien par absorption directe par la surface (e.g végétation, eau, bâtiments), entraînée par les mécanismes de diffusion et de turbulence.

En pratique, l'évaluation du dépôt sec s'appuie sur l'estimation d'un flux de dépôt Φ_{sec} (masse de polluant par unité de surface et par unité de temps, $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$) modélisé par le produit de la concentration de l'espèce considérée dans l'air au voisinage du sol ($z = 0$) et de la vitesse de dépôt V_d qui peut varier sur plusieurs ordres de grandeurs en fonction de l'état des surfaces réceptrices (forêt, neige, prairie, etc.) et des propriétés physico-chimiques du polluant (gaz ou particule, et dans ce dernier cas, taille de la particule) :

$$\Phi_{sec}(x, y, t) = V_d(x, y, t) \times c(x, y, t) \quad (1.12)$$

La représentation des processus physiques de transfert des polluants en fonction de la turbulence atmosphérique, du type de surface et du diamètre des particules (pour un polluant sous forme aérosol) est à l'origine des incertitudes liées à la paramétrisation du dépôt sec dans les modèles de dispersion atmosphérique (Sehmel, 1980; Baklanov and Sørensen, 2001; Sportisse, 2007).

Dépôt humide

Le dépôt humide, appelé aussi lessivage, est le processus de captation des polluants présents dans l'atmosphère par les hydrométéores (gouttes de pluie, flocons de neige, brouillard) entraînant leur chute vers le sol. Il existe deux types de lessivage : (i) le lessivage dans le nuage (*in-cloud scavenging*), où les polluants sont captés par les gouttes d'eau ou de glace du nuage, (ii) et sous le nuage (*below-cloud scavenging*) où les particules (ou gaz) présents dans l'atmosphère sont entraînés au sol par les précipitations. Le lessivage dans le nuage est particulièrement efficace, mais il ne se produit que si le rejet a lieu à une hauteur suffisante pour qu'une partie du panache soit dans le nuage, ou bien à grande distance, lorsque le panache est bien étalé sur la verticale.

En pratique, la modélisation du dépôt humide est basée sur certaines hypothèses. Par exemple, en supposant que la pluie est homogène spatialement et qu'elle tombe verticalement, le flux de dépôt humide Φ_{humide} (quantité déposée par unité de surface et de temps) peut être exprimé de la façon suivante :

$$\Phi_{humide}(x, y, t) = \Lambda P \int_0^{+\infty} c(x, y, z, t) dz \quad , \quad (1.13)$$

où P est l'intensité de pluie (mm.h^{-1}), Λ un coefficient de lessivage empirique dépendant de l'espèce considérée, notamment sa forme physico-chimique (gaz ou particule) et c la concentration dans l'air.

L'équation précédente contient deux paramètres incertains : (i) l'intensité de précipitation qui peut être locale, et dont la prévisibilité est variable selon la situation, et (ii) le coefficient de lessivage qui dépend des propriétés physico-chimiques des polluants (notamment de la taille des particules), des propriétés des hydrométéores (y compris leur distribution en taille) et de la hauteur des nuages, paramètre également incertain (Duhanan and Roustan, 2011).

1.7.2 Désintégration radioactive

La désintégration, ou décroissance, radioactive est le phénomène par lequel le noyau d'un atome « instable », dit radioactif, se désintègre spontanément jusqu'à ce qu'il devienne « stable », en émettant des rayonnements sous forme de noyaux d'hélium (désintégration alpha, α), d'électrons (désintégration bêta, β) et/ou de photons de haute énergie (désintégration gamma, γ). On appelle ces émissions *la radioactivité*.

Loi de désintégration radioactive

Du fait que la désintégration est une transformation spontanée, un radionucléide, à un instant donné, a autant de probabilité de se désintégrer qu'un autre de la même espèce.

À l'instar de la loi des grands nombres, si l'on considère un échantillon de N noyaux d'un radionucléide, pendant un intervalle de temps dt , la proportion de noyaux dN qui subissent une désintégration radioactive sera sensiblement constante, et égale à :

$$dN = -\lambda N dt \quad , \quad (1.14)$$

avec λ la constante radioactive qui caractérise le radionucléide et le mode de désintégration considéré, et qui a une dimension inversement proportionnelle au temps (s^{-1}).

En intégrant l'équation 1.14 dans le temps, il résulte que le nombre de noyau (N) diminue avec le temps suivant une décroissance exponentielle. C'est la loi de désintégration radioactive :

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t} \quad , \quad (1.15)$$

avec N_0 le nombre de noyaux initialement présents dans l'échantillon ($N(t=0)$).

À partir de cette loi on définit *la période radioactive* (ou temps de demi-vie) d'un radionucléide, notée $\tau_{1/2}$, qui est le temps nécessaire pour que la moitié des noyaux initialement présents soit désintégrée. On a alors :

$$\tau_{1/2} = \frac{\ln(2)}{\lambda} = \frac{1}{\lambda} \quad (1.16)$$

Notion de l'activité

On appelle activité d'une source radioactive à l'instant t , notée $A(t)$, le produit du nombre de noyaux la constituant $N(t)$ par la constante radioactive du radionucléide correspondant :

$$A(t) = \lambda N(t) \quad (1.17)$$

Physiquement, l'activité est la vitesse de désintégration d'un échantillon radioactif, exprimée en Becquerel (Bq) qui représente le nombre de désintégrations par seconde.

Filiation radioactive

La désintégration d'un radionucléide Ψ_1^* , peut conduire à la formation d'un radionucléide Ψ_2^* différent, qui sera lui-même susceptible de se transformer. Ce processus continue jusqu'à la formation d'un atome Ψ_n stable. On parle alors de *filiation radioactive* (ou chaîne radioactive) :



On appelle l'ensemble des radionucléides de la chaîne « *famille* », où le premier radionucléide s'appelle « *père* » (ou ancêtre) et les suivants sont les « *descendants* ».

Ainsi, l'activité d'un radionucléide se trouvant dans l'atmosphère, dépend à la fois de sa formation par désintégration d'éléments plus lourds de sa famille, et de sa désintégration en éléments plus légers. En pratique, après détermination des radionucléides susceptibles d'être rejetés, la radioactivité résultant d'un rejet accidentel de substances radioactives dans l'atmosphère peut être modélisée à l'aide de la *loi de Bateman*, qui donne l'activité du $n^{\text{ième}}$ élément à partir de la quantité de son premier ancêtre (N_1) :

$$A_n(t) = N_1 \prod_{i=1}^n \lambda_i \times \sum_{i=1}^n \frac{e^{-\lambda_i t}}{\prod_{j=1, j \neq i}^n \lambda_i - \lambda_j} \quad (1.18)$$

1.8 Modélisation de la dispersion atmosphérique

1.8.1 Équation d'advection-diffusion

Forme générale

Dans les parties précédentes, nous avons présenté les différents mécanismes qui modifient l'évolution de la concentration des polluants atmosphériques : émissions, pertes (dépôt et décroissance radioactive, pour les radionucléides), advection et diffusion. Ces mécanismes sont modélisés à l'aide de *l'équation d'advection-diffusion*, qui découle du principe de la conservation de masse, pour exprimer l'évolution de la concentration d'une espèce se présentant dans l'atmosphère :

$$\underbrace{\frac{\partial c}{\partial t}}_{(1)} + \underbrace{\mathbf{U} \nabla c}_{(2)} = \underbrace{D \Delta c}_{(3)} + \underbrace{S - P}_{(4)} \quad (1.19)$$

Avec :

- (1) terme d'instantanéité (évolution de la concentration au cours du temps),
- (2) terme d'advection (transport par l'écoulement), produit scalaire du vent $U(u, v, w)$ avec le gradient de concentration,
- (3) terme de diffusion moléculaire, où D est le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce transportée,
- (4) les termes source (émissions) et puits (dépôt et décroissance radioactive dans le cas d'une espèce radioactive) de l'espèce, respectivement.

Forme moyennée : modélisation de la turbulence

La forme générale de l'équation d'advection-diffusion donne une solution instantanée et exacte de l'évolution de la concentration à l'échelle « microscopique ». Cependant, il n'est pas possible en pratique de résoudre cette équation de façon exacte, et il est nécessaire de faire des hypothèses supplémentaires pour la résoudre de façon analytique (sous certaines hypothèses) ou numérique. Comme l'écoulement de l'air dans la couche limite est turbulent, il est intéressant d'utiliser dans les équations une approche appelée *décomposition de Reynolds*, qui permet de décomposer les variables ψ de l'atmosphère sous forme de la somme d'un terme moyen $\langle \psi \rangle$ et d'un terme de fluctuation ψ' de moyenne nulle ($\langle \psi' \rangle = 0$) :

$$\psi = \langle \psi \rangle + \psi' \quad (1.20)$$

En pratique, la variable ψ peut être l'une des composantes du vent $U(u, v, w)$, la température potentielle θ ou une concentration :

$$u = \langle u \rangle + u' \quad ; \quad v = \langle v \rangle + v' \quad ; \quad w = \langle w \rangle + w' \quad ; \quad c = \langle c \rangle + c' \quad (1.21)$$

Ainsi, en introduisant cette décomposition dans l'équation 1.19, on obtient l'équation d'advection-diffusion pour la concentration moyenne $\langle c \rangle$:

$$\frac{\partial \langle c \rangle}{\partial t} + \langle \mathbf{U} \rangle \nabla \langle c \rangle = D \Delta \langle c \rangle - \underbrace{\nabla \cdot \langle \mathbf{U}' c' \rangle}_{(*)} + \langle S \rangle - \langle P \rangle \quad (1.22)$$

Cette forme moyennée de l'équation d'advection-diffusion est équivalente à la forme générale, à l'exception de l'apparition d'un terme supplémentaire (*), correspondant à la divergence du vecteur de flux turbulent $\langle \mathbf{U}' c' \rangle$, qui traduit l'existence du mécanisme de dispersion turbulente.

Pour résoudre l'équation d'advection-diffusion moyennée, il est nécessaire de définir, en premier lieu, les conditions aux limites du domaine simulé : (i) les flux entrant du domaine, (ii) un flux nul au niveau du sommet de la couche limite et au sol et (iii) le terme source (émissions) et les pertes par dépôt et, dans le cas de radionucléides, décroissance radioactive.

Fermeture des flux turbulents

L'évolution de la concentration moyenne d'une espèce est donnée par la résolution de l'équation (1.22). Cependant, cette unique équation admet quatre inconnues : la concentration moyenne $\langle c \rangle$ et les trois composantes spatiales du vecteur de flux turbulent de l'espèce considérée $\langle \mathbf{U}' c' \rangle$. Ce problème de résolution de l'équation d'advection-diffusion

est connu sous le nom du problème de *fermeture*. Pour y remédier, une solution classique repose sur l'expression des composantes du vecteurs $\langle \mathbf{U}'c' \rangle$ en fonction des variables connues de l'écoulement.

Par analogie à la diffusion moléculaire (loi de diffusion de Fick, équation 1.11), on suppose qu'il est possible d'exprimer le flux turbulent en fonction du gradient de la concentration moyennée, en introduisant un coefficient de diffusivité turbulente K qui dépend des caractéristiques de l'écoulement (Panofsky and Dutton, 1984) :

$$\langle \mathbf{U}'c' \rangle = -K\nabla\langle c \rangle \quad (1.23)$$

Ainsi, le problème de fermeture est réduit à la détermination de K , qui est représenté sous forme d'un tenseur dépendant de la position et de l'instant considéré. Par approximation, ce tenseur est supposé généralement constant dans le temps et uniforme dans l'espace. Ceci revient à dire que le flux turbulent dans une direction est uniquement proportionnel au gradient de la concentration moyenne dans cette direction. Cependant, les coefficients diagonaux de K peuvent être différents pour tenir compte de l'anisotropie de la turbulence.

$$K = \begin{pmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{pmatrix}$$

En pratique, la matrice K est estimée par des paramétrisations empiriques. De plus, la diffusion moléculaire est généralement supposée négligeable devant la diffusion turbulente ($K_x, K_y, K_z \gg D$).

1.8.2 Les modèles numériques de la dispersion atmosphérique

Dans cette partie, il ne s'agit pas de décrire les équations des modèles, mais plutôt le principe général des grandes familles de modèles numériques utilisés aujourd'hui pour la prévision de la dispersion des polluants atmosphériques. Dans la mesure où cette thèse se situe dans le cadre de la modélisation dite *gaussienne* (en particulier *les modèles à bouffées*), cette approche sera présentée plus en détail dans le paragraphe suivant.

Modèles eulériens

L'approche de modélisation eulérienne est une approche physique basée sur la résolution de l'équation 1.22 par discrétisation dans le temps et dans l'espace (Perkins et al., 2005). Cette discrétisation est faite sur une grille 3D composée de N points de grille. Concrètement, si l'on connaît les conditions initiales et les conditions aux limites du do-

maine simulé, l'équation (1.22) est transformée en un système discret de N équations à N inconnues (les valeurs de concentration dans chacun des points de grille). Ce processus de discrétisation est effectué par des schémas classiques d'analyse numérique, telles que la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis ou la méthode des éléments finis. Les modèles eulériens de chimie-transport ne résolvent pas directement l'écoulement atmosphérique, mais utilisent les champs météorologiques pré-calculés en donnée d'entrée et résolvent l'équation d'advection-diffusion (1.22). Ils sont très utilisés pour la prévision de la qualité de l'air et la dispersion de polluants diffus liés aux émissions naturelles ou anthropiques, et sont particulièrement adaptés pour intégrer les évolutions physico-chimiques des espèces réactives (Rouil et al., 2009; Mallet et al., 2007). Ils peuvent également être utilisés pour la modélisation de rejets accidentels ou de panaches provenant d'éruptions volcaniques à l'échelle régionale et continentale (Quélo et al., 2007; Mathieu et al., 2012; Lamotte et al., 2021).

La principale limitation des modèles eulériens provient principalement de l'utilisation d'un maillage : les processus de taille caractéristique inférieure à celle de la maille sont mal représentés. Par exemple, si l'on cherche à simuler la turbulence induite par des obstacles étroits comme les arbres, il faut définir une grille fine autour de la zone correspondante, ce qui augmente le coût de calcul. De même, en cas de rejet quasi-ponctuel (cheminée par exemple), la taille caractéristique du panache est inférieure à celle de la maille du modèle, tant que le panache n'a pas été suffisamment dilué sous l'effet de la diffusion turbulente ; c'est pourquoi les modèles eulériens ne sont adaptés, en cas de rejet accidentel notamment, qu'à partir d'une distance estimée à environ 5 à 8 mailles du point de rejet (Korsakissok, 2009).

Modèles lagrangiens

Le principe des modèles lagrangiens est basé sur le fait de suivre chaque « particule » du polluant indépendamment dans sa trajectoire à travers l'atmosphère (Stohl et al., 2005). Les particules se déplacent à la vitesse moyenne du vent, et leurs trajectoires sont influencées par la turbulence. En pratique, si l'on connaît les champs de vitesse moyenne $\langle u \rangle$ et de diffusion K , on peut écrire les équations du mouvement de chaque particule, en y rajoutant une composante stochastique qui modélise l'effet de la turbulence. Ainsi, pour prévoir la distribution de concentration d'un polluant, il faut émettre un grand nombre de particules depuis la source et suivre leurs trajectoires, puis compter le nombre de particules dans un volume donné. Ainsi, au contraire des modèles eulériens nécessitant un maillage, les modèles lagrangiens permettent de n'effectuer le calcul de la concentration que dans le (ou les) point(s) de l'espace où cela est nécessaire (Stohl et al., 2005; Jones et al., 2007; Stein et al., 2015). Les modèles lagrangiens permettent de modéliser la dispersion d'un

panache à différentes échelles, de la plus courte distance à l'échelle inter-continentale, et sont fréquemment utilisés pour simuler les rejets accidentels (Stohl et al., 2012; Draxler et al., 2015; Leadbetter et al., 2015; De Meutter et al., 2016).

Parmi les sources d'erreurs principales des modèles lagrangiens, on trouve les erreurs liées au comptage des particules dans un volume donné. Pour réduire cette erreur, il est nécessaire d'augmenter le nombre de particules, ce qui augmente linéairement le temps de calcul.

Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens sont basés sur une solution analytique de l'équation (1.22) sous certaines hypothèses simplificatrices. Selon la façon de représenter le rejet, on distingue deux types de modèles gaussiens (Figure 1.9) :

- *Modèles gaussiens de panache* (ou gaussien stationnaire) : Ces modèles suggèrent une modélisation de la distribution du panache émis par une source ponctuelle par une gaussienne selon des plans perpendiculaires à la direction du rejet, en posant les trois hypothèses suivantes : (i) l'émission est continue et de débit constant, (ii) le vent est suffisamment important pour que la diffusion turbulente dans la direction du vent soit négligeable devant l'advection et (iii) les conditions météorologiques sont stationnaires et homogènes. En pratique, la première hypothèse implique que la concentration en un point de l'espace est constante au cours du temps (les concentrations sont moyennées sur un pas de temps suffisamment long). Ensuite, la deuxième hypothèse permet de négliger la turbulence dans la direction du vent moyen (x). Finalement, la troisième hypothèse suppose qu'il n'y a plus de dépendance explicite des conditions météorologiques au temps.
- *Modèles gaussiens à bouffées* (ou gaussien instationnaire) : Ces modèles permettent de discrétiser le rejet en une série de rejets instantanés, chacun émettant une bouffée gaussienne transportée dans les trois directions par le champ du vent, qui peut être non-uniforme et instationnaire. Dans ce cas, les hypothèses (i) et (ii) des modèles de panache ne sont plus valables, et l'hypothèse (iii) est moins contraignante : on considère simplement que la météorologie est uniforme à l'intérieur d'une même bouffée, mais pouvant varier d'une bouffée à l'autre et dans le temps.

Les modèles gaussiens ont l'avantage de fournir une solution analytique de l'équation d'advection-diffusion. Ils sont très utilisés pour la prévision de la dispersion à courte et moyenne distance. Les modèles à bouffées, contrairement aux modèles de panache stationnaires, peuvent être utilisés à de plus grandes distances (jusqu'à quelques dizaines de kilomètres, voire une centaine de kilomètres de la source). Leur utilisation est particulièrement répandue dans le cas des rejets accidentels grâce à leur temps de calcul léger par

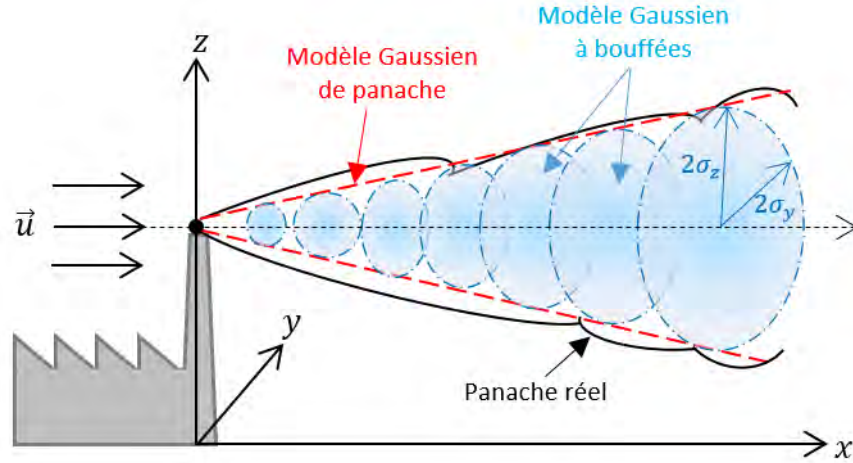


FIGURE 1.9 – Illustration schématique de la représentation d'un panache par un modèle gaussien de panache et un modèle gaussien à bouffées. Inspiré de [Korsakissok \(2009\)](#)

rapport aux autres types de modèles ([Korsakissok and Mallet, 2009](#); [Korsakissok et al., 2013](#); [Connan et al., 2014](#); [Zhuang et al., 2023](#)).

1.8.3 Les modèles gaussiens à bouffées

Représentation du panache

Comme nous l'avons abordé précédemment, la représentation gaussienne à bouffées s'appuie sur la discrétisation d'un panache en une succession de rejets instantanés, chacun émettant une bouffée gaussienne dans les trois directions de l'espace (x, y, z) . Alors, sous l'hypothèse de diffusion turbulente constante (K est une matrice diagonale), si Q est la quantité de polluants contenue dans une bouffée émise instantanément à l'instant t , la distribution de la concentration est donnée par la solution gaussienne de l'équation d'advection-diffusion (1.22) ([Roberts, 1923](#)) :

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{8(\pi t)^{3/2} (K_x K_y K_z)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2}{4K_x t}\right) \exp\left(-\frac{(y - y_c)^2}{4K_y t}\right) \exp\left(-\frac{(z - z_c)^2}{4K_z t}\right) \quad (1.24)$$

Où (x_c, y_c, z_c) sont les coordonnées du centre de la bouffée.

À partir de cette dernière équation, il est possible d'exprimer l'évolution dans le temps des écarts-types de la distribution gaussienne de concentration dans les différentes directions :

$$\sigma_\alpha(t) = \sqrt{2K_\alpha t} \quad ; \quad \alpha \in \{x, y, z\} \quad (1.25)$$

Cette forme de $\sigma_\alpha \propto t^{1/2}$, issue de l’hypothèse de la diffusion turbulente constante dans le temps, n’est applicable que très loin de la source, lorsque la bouffée devient suffisamment grande pour couvrir l’ensemble du spectre de taille des tourbillons (tous les tourbillons contribuent à la diffusion de la bouffée). Par contre, au voisinage de la source, les tourbillons dont la taille est plus importante que la bouffée provoquent le transport de son centre de masse, tandis que les tourbillons de plus petite taille sont particulièrement efficaces pour assurer le mélange du panache. Or, la théorie statistique de la diffusion montre que, lorsque le temps t est petit, la diffusion turbulente est plutôt linéaire en temps : $\sigma_\alpha(t) \propto t$ (Taylor, 1922).

Afin de s’affranchir des limitations de la fermeture turbulente, il est possible de reformuler l’équation 1.24, de façon à faire apparaître explicitement ces écarts-types :

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(x - x_c)^2}{\sigma_x^2}\right) \exp\left(-\frac{(y - y_c)^2}{\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{(z - z_c)^2}{\sigma_z^2}\right) \quad (1.26)$$

Ainsi, le problème de la résolution de l’équation d’advection-diffusion se réduit finalement à la détermination des lois des écarts-types gaussiens de dispersion. En pratique, ces lois sont déterminées en fonction de la distance à la source (ou du temps de trajet de la bouffée) par des paramétrisations empiriques, dépendant elles-mêmes de la représentation de la turbulence atmosphérique par la stabilité de l’atmosphère. Ces deux formulations sont calibrées sur des expériences permettant d’évaluer la dispersion dans différentes conditions météorologiques, et pour des types de sol variés (milieux rural, urbain).

Les paramétrisations de stabilité atmosphérique et les lois empiriques des écarts-types utilisées dans le présent manuscrit sont présentées ci-après.

Paramétrisations de la stabilité atmosphérique

Il existe deux approches de paramétrisation de la stabilité de l’atmosphère : l’approche *continue* et l’approche *discrète*. L’approche continue s’appuie sur le formalisme théorique de la *similitude* de Monin-Obukhov (Monin and Obukhov, 1959; Korsakissok, 2009; Vendel, 2011), permettant de décrire de façon continue l’état de la stabilité atmosphérique à l’aide de la « longueur de Monin-Obukhov ». Ces méthodes permettent de calculer les écarts-types de la dispersion de façon fine, mais leur précision dépend de la disponibilité de données permettant de caractériser les paramètres atmosphériques de la similitude (les flux turbulents dans la couche de surface par exemple). L’approche discrète, quant à elle, s’appuie sur le fait que la stabilité dépend principalement du vent et du gradient vertical de température, qui lui-même dépend du rayonnement solaire de surface le jour, ou de la couverture nuageuse pendant la nuit (c.f., Paragraphe 1.4). Ces paramètres sont utilisés

pour discrétiser l'état de l'atmosphère en un certain nombre de classes de stabilité. Les approches discrètes présentent l'avantage d'être très simples à implémenter numériquement (utilisation des données météorologiques de base), ce qui les rend favorables pour l'évaluation de la dispersion en situations d'urgence nucléaire. Pour ces raisons, ces approches sont retenues dans le cadre de ce travail de thèse, et les classifications utilisées sont celles de *Doury* (Doury, 1976) et de *Pasquill-Turner* (Pasquill, 1961).

Les classes de stabilité de Doury. Ce diagnostic présente une description simplifiée de l'atmosphère en deux classes seulement, selon le gradient vertical de température : (i) diffusion normale (*DN*), si le gradient de température est inférieur à -0.5 °C sur 100 m (atmosphère stable), et (ii) diffusion faible (*DF*), si le gradient est supérieur à -0.5 °C sur 100 m (atmosphère instable ou neutre) :

$$\frac{\partial T}{\partial z} \begin{cases} \leq -0.5(\text{°C}/100\text{m}) & : \text{DN} \\ > -0.5(\text{°C}/100\text{m}) & : \text{DF} \end{cases} \quad (1.27)$$

On note que cette paramétrisation ne tient pas compte de la turbulence d'origine mécanique, mais seulement de la turbulence thermique.

Les classes de stabilité de Pasquill-Turner. Ce diagnostic, quant à lui, repose sur une représentation plus fine de l'atmosphère : la stabilité est discrétisée en six classes de A (très instable) à F (très stable). Ces classes sont déterminées dans cette thèse par deux diagnostics (il existe une quantité de variantes permettant de déterminer des classes de stabilité de Pasquill en fonction de différents paramètres de l'atmosphère, voir par exemple (Seinfeld and Pandis, 1998)) :

- Diagnostic de Turner (Turner, 1969), présenté dans le Tableau 1.2, et qui présente l'avantage de tenir compte des deux sources de turbulence (mécanique et thermique).
- Diagnostic du gradient de température à 100 m (Seinfeld and Pandis, 1998) présenté dans le Tableau 1.3. Ce diagnostic ne tient compte que de la turbulence thermique.

Lois empiriques des écarts-types de dispersion

Loi de Doury. La formulation de Doury a été spécifiquement développée pour l'application aux radionucléides, et déterminée empiriquement sur des expériences de dispersion en champ relativement lointain.

La forme générale des écarts-types de Doury est :

Vent à 10 m (m.s ⁻¹)	Jour			Nuit	
	Rayonnement solaire de surface (W.m ⁻²)			Couverture nuageuse (%)	
	Fort]700, +∞]	Modéré [350, 700]	Faible [0, 350[[4/8, 7/8]	[0, 3/8]
<2	A	A-B	B	F	F
3	A-B	B	C	E	F
3 - 5	B	B-C	C	D	E
5 - 6	C	C-D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

TABLE 1.2 – Les classes de stabilité de Pasquill-Turner, d’après Turner (1969).

Stabilité atmosphérique	Pasquill	$\partial T/\partial z$	Doury
Instable	A]-∞, -1.9[Diffusion normale (DN)
	B	[-1.9, -1.7[
	C	[-1.7, -1.5[
Neutre	D	[-1.5, -0.5[Diffusion faible (DF)
Stable	E	[-0.5, 1.5[
	F	[1.5, +∞[

TABLE 1.3 – Les classes de stabilité de Pasquill, d’après le diagnostic du gradient de température à 100 m, et la correspondance avec les classes de Doury.

$$\sigma_y = (A_h t)^{B_h} \quad , \quad \sigma_z = (A_z t)^{B_z} \quad (1.28)$$

Avec t le temps de transfert depuis l’émission de la bouffée. Les coefficients A_h , A_z , B_h et B_z sont déterminés, dans le Tableau 1.4, en fonction des classes de Doury.

Temps de trajet (s)	Diffusion normale (DN)				Diffusion faible (DF)			
	A_h	A_z	B_h	B_z	A_h	A_z	B_h	B_z
$0 < t \leq 240$	0.405	0.42	0.859	0.814	0.405	0.20	0.859	0.50
$240 < t \leq 3280$	0.135	1.00	1.130	0.685	0.135	0.20	1.130	0.50
$3280 < t \leq 97000$	0.135	20.0	1.130	0.50	0.135	0.20	1.130	0.50
$97000 < t \leq 508000$	0.463	20.0	1.00	0.50	0.463	0.20	1.00	0.50
$508000 < t \leq 1300000$	6.50	20.0	0.824	0.50	6.50	0.20	0.824	0.50
$t > 1300000$	2.10^5	20.0	0.50	0.50	2.10^5	0.20	0.50	0.50

TABLE 1.4 – Les coefficients de Doury pour la diffusion faible et la diffusion normale.

Loi de Pasquill. La formulation de Pasquill utilise les six classes de Pasquill pour déterminer les écarts-types gaussiens de dispersion en fonction de la distance de transfert

d'une bouffée.

Les écarts-types de Pasquill sont fournis par la forme générale :

$$\sigma = \alpha x^\beta + \gamma \quad (1.29)$$

Où x est la distance de transfert depuis l'émission de la bouffée. Les constantes α , β et γ sont déterminées, en fonction des classes de stabilité de Pasquill, dans les Tableaux 1.5 et 1.6 pour σ_y et σ_z , respectivement.

Classes de Pasquill	$x < 1000$ m			$x > 1000$ m		
	α	β	γ	α	β	γ
A	0.5734	0.585	0	0.5734	0.858	0
B	0.3337	0.889	0	0.3337	0.889	0
C	0.2052	0.903	0	0.2052	0.903	0
D	0.1284	0.908	0	0.1284	0.908	0
E	0.09057	0.914	0	0.09057	0.914	0
F	0.06419	0.908	0	0.06419	0.908	0

TABLE 1.5 – Les coefficients de Pasquill pour σ_y .

Classes de Pasquill	$x < 1000$ m			$x > 1000$ m		
	α	β	γ	α	β	γ
A	$0.998 \cdot 10^{-3}$	1.89	10	$0.998 \cdot 10^{-3}$	1.89	10
B	0.0482	1.11	0	0.0482	1.11	0
C	0.119	0.915	0	0.119	0.915	0
D	0.108	0.822	0	0.108	0.822	0
E	0.135	0.745	0	52.51	0.15	-124.8
F	0.0949	0.727	0	3.786	0.306	-16.8

TABLE 1.6 – Les coefficients de Pasquill pour σ_z .

1.9 Modélisation et prévision météorologique

Comme nous l'avons vu dans les paragraphes précédents, la dispersion atmosphérique est déterminée par l'évolution des conditions de l'atmosphère. Ainsi, la météorologie constitue une donnée d'entrée essentielle pour les modèles de dispersion atmosphérique.

1.9.1 La Prévision Numérique du Temps (PNT)

Principe

La prévision numérique du temps (PNT) est l'estimation des variables météorologiques décrivant l'état de l'atmosphère à un instant ultérieur dans le temps, qui s'étend généralement de quelques heures à quelques jours de prévision, à l'aide d'un modèle de PNT. Ces prévisions sont faites dans un temps contraint pour permettre leur exploitation opérationnelle.

L'atmosphère étant un fluide géophysique (généralement considéré comme un gaz parfait), un modèle de PNT est un outil informatique qui modélise l'atmosphère à l'aide des lois de la mécanique des fluides. Il prend aussi en compte de nombreux processus physiques, comme les changements de phase de l'eau, les interactions avec la surface, le rayonnement solaire et terrestre, etc. Les modèles de PNT permettent alors de résoudre un système d'équations complexes à partir d'un état initial supposé connu, dans le but de prévoir les paramètres clés de l'atmosphère en utilisant des techniques numériques approchées. Les schémas numériques utilisés par les modèles de PNT permettent de discrétiser l'atmosphère sur une grille 3D dont la distribution des points de grille peut être régulière ou variable. La distance entre deux points de grille définit la résolution spatiale du modèle, selon les directions horizontales et verticales. Le choix d'une résolution spatiale dépend principalement du temps de calcul et des échelles des phénomènes représentés par le modèle : plus la résolution spatiale du modèle est fine, plus la représentation des phénomènes à petite échelle est réaliste et plus le temps de calcul est grand. En plus de la discrétisation spatiale, le système d'équations physiques dans un modèle de PNT est discrétisé aussi dans le temps, selon un pas de temps Δt (ie, résolution temporelle).

Formalisme mathématique

L'intégration temporelle du vecteur d'état de l'atmosphère $\vec{x}(t)$, entre deux instants consécutifs (t) et ($t + \Delta t$), s'écrit :

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \mathcal{M}(\vec{x}) \quad (1.30)$$

Où \mathcal{M} est un opérateur non-linéaire qui décrit l'évolution du système atmosphérique. En pratique, l'opérateur \mathcal{M} dispose de deux parties :

- Une partie *dynamique* que le modèle peut résoudre. On parle de la discrétisation spatio-temporelle des équations qui représentent les phénomènes dont l'échelle caractéristique est supérieure ou comparable à l'échelle de la maille.
- Une partie *physique* (appelée aussi paramétrisation), qui consiste en des termes correctifs ajoutées aux équations dynamiques pour prendre en compte l'effet des

phénomènes dont l'échelle est inférieure à la maille. Par exemple, la turbulence, qui se développe sur une échelle très fine, est considérée comme un phénomène sous-maille qui est paramétré dans les modèles de PNT.

L'intégration du système (1.30) requiert la détermination d'un vecteur d'état initial de la prévision $\vec{x}(t = t_0)$. Pour ce faire, l'une des approches les plus efficaces est l'utilisation des méthodes d'*assimilation de données* (Carrassi et al., 2018). Cet aspect est abordé dans les paragraphes suivants.

Types des modèles de PNT

Dans cette partie on introduit brièvement une classification des modèles de PNT, en se basant sur leur couverture géographique. Ainsi, deux types de modèles sont à distinguer :

- *Modèles globaux* : Un modèle de PNT est dit global quand il couvre l'ensemble du globe, en discrétisant l'atmosphère dans le temps et dans l'espace sur une grille 3D, avec pour contre-partie d'utiliser des mailles de taille généralement grossière (aujourd'hui, de l'ordre de la dizaine de kilomètre) et un pas de temps assez grand. Les modèles globaux sont dédiés à la représentation des mouvements de grande échelle, c'est-à-dire les phénomènes de taille supérieure à une dizaine de kilomètres tels que les dépressions, les anticyclones et la circulation globale. Par contre, ces modèles ne permettent pas de simuler explicitement les phénomènes météorologiques à l'échelle kilométrique, tels que les cellules orageuses et les phénomènes convectifs en général. Cela est dû principalement à l'*hypothèse de l'hydrostatisme*, qui consiste à négliger le terme d'accélération verticale dans l'équation de la vitesse, ce qui revient à supposer que la force de gravité et le gradient vertical de la pression s'équilibrent instantanément : $\partial p / \partial z = -\rho g$. Par exemple, le modèle ARPEGE de Météo-France (Courtier et al., 1991) est un modèle global hydrostatique.
- *Modèles régionaux* (ou modèles à aire limitée) : Comme leur nom l'indique, ce sont des modèles qui couvrent un domaine géographique limité, qui peut être un pays ou un continent par exemple. Les modèles régionaux reposent sur une discrétisation plus fine que les modèles globaux. En plus, grâce de leur haute résolution spatiale (de l'ordre du kilomètre aujourd'hui), ces modèles sont capables de simuler des phénomènes météorologiques de petites échelles. Par exemple, le modèle AROME (de Météo-France) documenté dans le Paragraphe 2.3, et qui est utilisé dans ces travaux de thèse est un modèle régional non-hydrostatique.

1.9.2 Sources d’incertitude dans les prévisions

Bien que les modèles de PNT ont beaucoup progressé depuis 50 ans (Bauer et al., 2015) et apportent des informations cruciales pour anticiper les phénomènes météorologiques dangereux, et pour la sécurité des personnes et des biens, les prévisions de ces modèles restent toujours imparfaites à cause de l’existence de plusieurs sources d’erreurs significatives. Parmi ces sources d’erreurs, on trouve par exemple la représentation des surfaces océaniques et terrestres dans les modèles, ainsi que les erreurs liées aux conditions aux bords dans le cas des modèles à aire limitée. Cependant, les erreurs les plus influentes proviennent principalement de la sensibilité aux conditions initiales (Argence et al., 2008) et du modèle lui-même qui n’est pas parfait (Buizza et al., 1999).

Sensibilité aux conditions initiales

On ne connaît jamais parfaitement l’état de l’atmosphère à un instant donné. De plus, étant donné la non-linéarité et la nature chaotique de l’atmosphère (Lorenz, 1963), les faibles erreurs dans les conditions initiales peuvent s’amplifier en peu de temps en dégradant énormément la qualité de la prévision. À la lumière de cette constatation, on conçoit que l’état initial est un ingrédient déterminant et crucial pour la PNT. L’une des approches les plus sophistiquées qui est utilisée aujourd’hui pour l’estimation de l’état initial des modèles de PNT est *l’assimilation de données*. On note que ce processus permet d’obtenir un état initial optimal étant donné les observations disponibles, mais qui comporte encore des incertitudes. Ce processus est décrit dans le paragraphe suivant.

Imperfection des modèles

Une autre source d’incertitude provient du modèle de prévision lui-même, qui ne décrit pas parfaitement tous les processus atmosphériques. Les sources d’erreurs du modèle peuvent être liées soit à sa partie dynamique (par exemple, la discrétisation et l’intégration dans le temps), aux paramétrisations physiques (par exemple, la convection, les nuages et la couche limite) ou encore aux processus couplés (par exemple, les échanges océan-atmosphère).

1.9.3 Estimation de l’état initial par assimilation de données

L’assimilation de données (Bouttier and Courtier, 2002) est la discipline mathématique qui vise à combiner les observations disponibles de l’état d’un système donné, à un instant donné, avec l’état simulée par un modèle, de façon à avoir un état « postérieur » le plus proche possible de la réalité. Dans ce paragraphe on présente de façon générale le principe

de l'approche d'assimilation dite *variationnelle* (Courtier et al., 1994), et qui est utilisée dans le modèle AROME pour estimer l'état initial.

Dans ce contexte, l'objectif de l'assimilation est d'estimer le vecteur d'état initial qui sera utilisé pour la prévision de la façon la plus optimale, en utilisant les observations de diverses natures (satellite, radars, in-situ au sol ou par avion, etc). Le vecteur résultant de ce processus est appelé *l'analyse* (noté x_a). Les observations sont, de facto, limitées et incomplètes, pour des raisons de représentativité spatiale et en raison des incertitudes qui y sont associées. Pour obtenir l'analyse, on utilise une prévision antérieure faite par le modèle, appelée *l'ébauche* (noté x_b), qu'on corrige par les observations (noté y_{obs}).

Les observations ne sont pas directement comparables au vecteur d'état du modèle. D'une part parce que les observations peuvent ne pas être exactement co-localisées avec les points de grille du modèle, ensuite parce que la variable mesurée peut ne pas être une variable d'état du modèle (c'est le cas des radiances satellitaires par exemple). La comparaison entre le vecteur d'état x (contenant les données modèle) et le vecteur d'observations y_{obs} est faite à l'aide d'un opérateur \mathcal{H} , qui permet de passer de l'espace du modèle à celui des observations. Le vecteur d'observations y_{obs} est alors estimé comme suit :

$$y_{obs} = \mathcal{H}(x) + \epsilon_{obs} \quad , \quad (1.31)$$

avec ϵ_{obs} l'écart-type des erreurs d'observation, qui tient compte des erreurs de mesures, de représentativité et de formalisation de l'opérateur \mathcal{H} . Ce dernier est ensuite linéarisé et noté \mathbf{H} (Courtier et al., 1994).

L'objectif des méthodes variationnelles est alors de construire un état qui minimise *une fonction coût* notée \mathcal{J} , en se basant sur l'écart entre les états du modèle et les observations. La fonction \mathcal{J} détermine alors l'erreur commise par rapport à l'observation y_{obs} (notée \mathcal{J}_{obs}) et par rapport à l'ébauche x_b (notée \mathcal{J}_b). On a alors $\mathcal{J} = \mathcal{J}_{obs} + \mathcal{J}_b$ (Figure 1.10). La détermination de l'état initial se réduit ainsi à un problème d'optimisation, telle que :

$$\mathcal{J}(x_a) = \min(\mathcal{J}(x)) \quad (1.32)$$

On note que l'optimisation de la fonction coût se fait par itération, et l'analyse à un instant donné est alors utilisée pour démarrer la prévision qui produira l'ébauche de l'instant suivant. La fonction coût s'exprime comme :

$$\mathcal{J}(x) = \frac{1}{2}(x - x_b)^T \mathbf{B}^{-1}(x - x_b) + \frac{1}{2}(y_{obs} - \mathbf{H}(x))^T \mathbf{R}^{-1}(y_{obs} - \mathbf{H}(x)) \quad , \quad (1.33)$$

où \mathbf{B} et \mathbf{R} sont les matrices de covariance d'erreur sur l'ébauche et les observations,

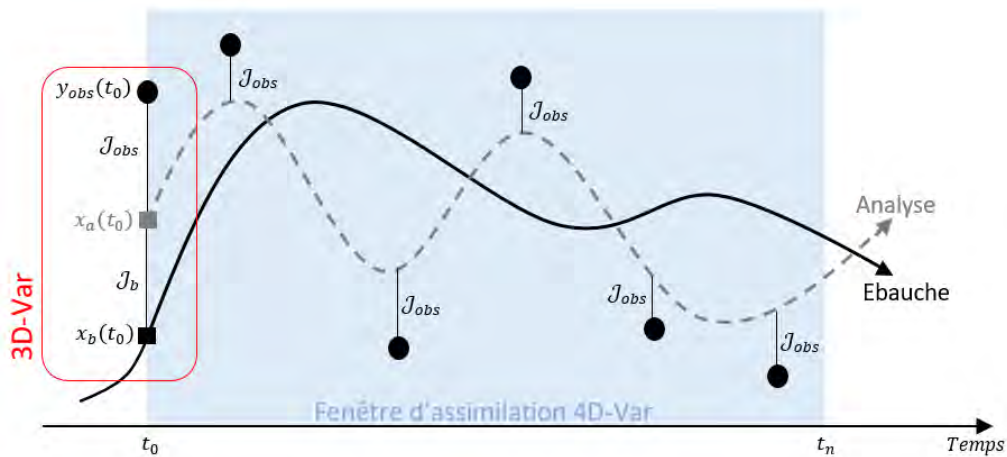


FIGURE 1.10 – Illustration des deux approches d’assimilation séquentielle 3D-var et 4D-var. Cette dernière assimile les observations les plus récentes (points) en s’appuyant sur la trajectoire de l’ébauche (courbe noire) : à partir de l’état initial analysé ($x_a(t_0)$), l’ébauche est rectifiée (courbe grise en pointillés) jusqu’au bout de la fenêtre d’assimilation (l’aire en bleu). L’encadré rouge à gauche montre le cas particulier de l’approche 3D-var, qui permet d’estimer l’état initial optimal ($x_a(t_0)$) à un pas de temps fixe (t_0). Inspiré de [Lahoz and Schneider \(2014\)](#)

respectivement. Le premier terme représente l’écart à l’ébauche, alors que le deuxième représente l’écart aux observations.

Selon l’inclusion ou non de la dimension temporelle, on distingue deux méthodes principales de l’assimilation variationnelle (Figure 1.10) :

- L’approche *3D-var*, où le processus d’assimilation décrit précédemment se fait à un pas de temps fixe dans les trois dimensions de l’espace (x, y, z). Cette approche est utilisée pour estimer un état optimal à un instant fixe.
- L’approche *4D-var*, qui inclut la dimension temporelle. Au contraire du 3D-var, cette approche ne vise pas à obtenir l’état optimal à un instant donné, mais la trajectoire optimale sur une fenêtre de temps donnée.

1.9.4 Limitations de la modélisation déterministe

Les modèles de PNT sont utilisés quotidiennement non pas uniquement par les services météorologiques nationaux, mais aussi par plusieurs autres acteurs, pour produire des prévisions météorologiques dans plusieurs domaines qui sont sensibles à la météorologie. Par exemple, les PNT sont incontournables dans les domaines de l’agriculture ([Baker and Kirk, 2007](#); [Trnka et al., 2011](#); [Aleksavska et al., 2021](#)), la production d’énergie renouvelable ([Zamo et al., 2014a,b](#); [Cheneka et al., 2020, 2021](#)), la qualité de l’air ([Mallet and Sportisse, 2006](#); [Besse et al., 2007](#)), la gestion des crises nucléaires ([Korsa-](#)

kissok et al., 2020; Le et al., 2021), etc. En revanche, l'approche historique utilisée de la PNT consistait à produire une seule prévision à partir d'une seule donnée d'entrée, et à l'aide d'un seul modèle. Cette approche, connue sous le nom de *modélisation déterministe*, donne une estimation de l'évolution de l'atmosphère à un instant donné (une seule prévision par échéance). Cependant, l'atmosphère étant un système à caractère chaotique (Lorenz, 1963), une prévision déterministe reste largement insuffisante et insatisfaisante pour échantillonner toute la gamme des états probables de l'atmosphère.

Ainsi, les modèles déterministes sont toujours entachés d'incertitudes, qui peuvent limiter, dans certains cas, leur utilisation opérationnelle. Dans ces cas, il est intéressant d'utiliser une autre approche de prévision numérique qui soit capable de décrire le plus complètement possible le spectre des évolutions possibles de l'atmosphère, en tenant compte des différentes sources d'incertitude. Cette approche de modélisation numérique probabiliste est connue sous le nom de *la modélisation d'ensemble* (en particulier *la prévision d'ensemble*).

1.9.5 Vers l'estimation des incertitudes : prévision d'ensemble

La prévision d'ensemble (Figure 1.11) consiste à utiliser un modèle numérique de prévision plusieurs fois à partir d'un ensemble de conditions initiales différentes entre elles et/ou éventuellement des configurations différentes du modèle. Les différents états initiaux sont le plus souvent construits à partir d'une assimilation de données elle-même ensembliste. Cette dernière génère un ensemble d'analyses dont la diversité vise à représenter l'incertitude sur l'état initial de la prévision. L'utilisation de différentes configurations du modèle vise, quant à elle, à représenter les limites de la modélisation atmosphérique. Ainsi, l'ensemble des prévisions résultant présente une estimation de la distribution de probabilité de l'évolution possible de l'atmosphère. En pratique, l'idée de la prévision d'ensemble repose sur l'utilisation d'un ensemble composé de N prévisions appelées « *membres* », au lieu d'une seule prévision déterministe. Cet échantillon de prévision permet de quantifier le caractère incertain de l'évolution de l'atmosphère et d'estimer le (ou les) scénario(s) d'évolution le (ou les) plus probable(s).

En opérationnel, même si la prévision d'ensemble permet d'obtenir une information plus complète de l'évolution de l'atmosphère, elle présente en contre-partie plusieurs problématiques. Bien entendu, réaliser plusieurs prévisions nécessite des ressources informatiques plus importantes que dans le cas d'une prévision déterministe. Il se pose donc la question du nombre de membres nécessaire pour obtenir un ensemble fiable. Cette question a été traitée par certains travaux, comme Leith (1974) qui montre qu'un ensemble composé d'un nombre de membres assez restreint (de l'ordre de 10 membres) permet d'avoir de l'information utile, alors que des travaux ultérieurs, par exemple Tempest et al.

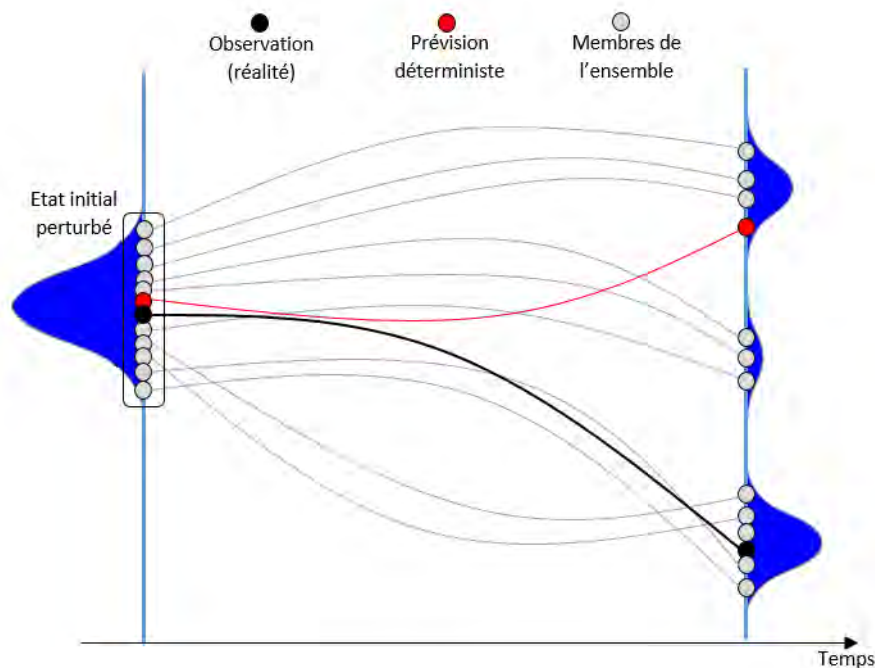


FIGURE 1.11 – Illustration schématique du principe de la prévision d'ensemble. Les courbes grises correspondent aux membres de l'ensemble, obtenus à partir de perturbation de l'état initial. Les courbes noire et rouge représentent la prévision déterministe et l'observation, respectivement. Inspiré du schéma de Laurent Descamps, Météo-France.

(2023), ont montré que cet ensemble reste insuffisant pour décrire complètement les distributions de probabilités. Cependant, la question la plus importante dans la construction des ensembles météorologiques concerne les méthodes de perturbation appropriée pour construire l'ensemble des états initiaux. À l'heure actuelle, la plupart des centres de prévisions qui font de la prévision d'ensemble, dont Météo-France, généralisent l'approche ensembliste à l'assimilation de données pour obtenir un ensemble d'analyses qui serviront d'états initiaux aux prévisions. Cette approche est documentée dans le chapitre suivant (c.f., Paragraphe 2.3.3). Dans la littérature, d'autres méthodes de perturbation des conditions initiales existent. Pour en savoir plus, le lecteur pourra se référer aux travaux suivants : Toth and Kalnay (1993); Buizza and Palmer (1995); Raynaud and Bouttier (2016); Leutbecher et al. (2017).

Il existe également plusieurs approches pour représenter les incertitudes liées à la modélisation. Ces méthodes sont largement documentées dans Wimmer (2021). Parmi les plus connues, on trouve : (i) *le multimodèle*, qui utilise des modèles différents pour générer les différents membres de l'ensemble, (ii) l'approche *multiphysique d'ensemble* (Lafaysse et al., 2017), où chaque membre utilise un jeu de paramétrisations différent, (iii) *la perturbation stochastique des tendances* (ou SPPT, pour Stochastically Perturbed Parametrization Tendencies; Palmer et al. (2009); Bouttier et al. (2012); Wastl et al.

(2019)), où des nombres aléatoires sont inclus dans la partie physique des équations de mouvement, (iv) *la perturbation stochastique des paramètres des paramétrisations* (ou SPP pour Stochastically Perturbed Parametrizations ; McTaggart-Cowan et al. (2022)), où les valeurs d'un jeu de paramètres sont modifiées de façon aléatoire.

1.10 Objectif, problématique et plan de la thèse

Nous avons vu dans ce chapitre que les prévisions météorologiques font l'objet d'incertitudes significatives provenant de plusieurs sources. Dans la mesure où l'information météorologique représente une donnée d'entrée cruciale pour les modèles de dispersion atmosphérique, il est indispensable de tenir compte de la propagation des incertitudes météorologiques dans les simulations de la dispersion, et cela d'autant plus quand il s'agit des rejets accidentels de polluants radioactifs dans l'atmosphère. Par ailleurs, nous avons aussi vu que les services météorologiques, dont Météo-France, disposent aujourd'hui de modèles météorologiques qui fournissent des prévisions d'ensemble, capables d'estimer les incertitudes. L'objectif principal de cette thèse est ainsi d'explorer l'usage des ensembles météorologiques, afin de réaliser des prévisions d'ensemble de la dispersion atmosphérique, permettant d'obtenir les différents scénarios de la dispersion à courte distance des radionucléides en cas d'accidents nucléaires. Pour atteindre cet objectif, la démarche scientifique de cette thèse repose sur les questionnements suivants :

- **Q1** : Quel est l'apport de la prévision d'ensemble à fine-échelle dans le processus de la prévision de la dispersion atmosphérique à courte distance des radionucléides en cas d'accidents nucléaires ?
- **Q2** : Quelle est la meilleure façon de joindre plusieurs ensembles météorologiques, couvrant des échéances différentes, afin d'assurer une continuité temporelle des prévisions de la dispersion sur une longue durée en cas d'accidents nucléaires ?
- **Q3** : Quelle est la meilleure configuration des modèles de dispersion gaussiens pour la prévisions des dépassements de seuil de concentration des radionucléides dans l'air ?
- **Q4** : Comment peut-on réduire le coût de calcul associé à l'utilisation des ensembles à fine-échelle (transfert et post-traitement météorologique et calcul de la dispersion) en cas de situations d'urgences nucléaires ?

Le présent manuscrit explore l'ensemble de ces questionnements selon le plan suivant :

Chapitre 2 : le contexte expérimental de ces travaux de thèse est détaillé dans ce chapitre. Après la présentation de la zone d'étude, une grande partie est consacrée à la description des campagnes de mesures expérimentales (observations météorologiques et radiologiques). Les modèles utilisés sont ensuite présentés. Enfin, des

fondements théoriques des scores d'évaluation utilisés et de la classification non-supervisée sont introduits.

Chapitre 3 : ce chapitre présente la mise en place d'une chaîne de modélisation d'ensemble de la dispersion atmosphérique, couplant l'ensemble météorologique à fine-échelle de Météo-France (PEARO) avec le modèle gaussien de dispersion atmosphérique de l'IRSN (pX). Les données de mesures continues de la concentration de l'isotope du ^{85}Kr ont été mises à disposition, dans le cadre d'une campagne de mesures radiologiques menée, au Nord-Cotentin, par l'IRSN en parallèle de la thèse. Ces données sont alors utilisées pour : (i) comparer la performance des ensembles de la dispersion par rapport à la simulation déterministe et (ii) pour étudier la sensibilité du modèle pX à différents diagnostics de stabilité atmosphérique des écarts-types gaussien, utilisés pour modéliser la turbulence dans la couche limite atmosphérique.

Chapitre 4 : ce chapitre présente des tests complémentaires de sensibilité permettant de comprendre davantage les aspects traités dans le chapitre précédent, ainsi que l'impact des différentes méthodes de construction des prévisions météorologiques sur les résultats de la dispersion. De plus, un algorithme d'affectation est testé afin de construire des prévisions cohérentes, où les discontinuités temporelles sont diminuées.

Chapitre 5 : ce chapitre décrit les tests de clustering visant à réduire le nombre de simulations composant l'ensemble météorologique PEARO utilisé en entrée du modèle de dispersion pX, par la sélection des membres représentatifs.

Finalement, les principales conclusions de cette thèse sont synthétisées, avant de dresser les perspectives ouvertes par ces travaux.

Contexte expérimental et outils

Sommaire

2.1	Zone d'étude	56
2.2	Description des campagnes expérimentales	59
2.3	Le modèle déterministe AROME et la Prévision d'Ensemble AROME (PEARO)	74
2.4	Le modèle pX et ses applications	79
2.5	Évaluation des ensembles météorologiques et construction des prévisions « sans couture »	87
2.6	Réduction des ensembles météorologiques par « clustering »	94
2.7	Synthèse	99

Dans ce chapitre, on commence par présenter le contexte expérimental de ces travaux de thèse et les modèles numériques, météorologiques et de dispersion atmosphérique utilisés. Les scores d'évaluation météorologique sont ensuite présentés, ainsi que l'algorithme utilisé pour construire des prévisions d'ensemble cohérentes. Les aspects de base de la classification non-supervisée (clustering) sont ensuite développés, ainsi que les méthodes classiquement employées pour classifier les champs atmosphériques. Finalement, nous terminons par une synthèse reprenant les éléments essentiels du chapitre.

2.1 Zone d'étude

2.1.1 Le site expérimental de La Hague

Caractéristiques géographiques

La Hague est une presqu'île rocheuse et étroite d'environ 5 km de large et 15 km de long, étendue sur une superficie d'environ 150 km² au nord de la péninsule du Cotentin située au nord-ouest de la France (Figure 2.1). La Hague se caractérise par une topographie complexe, comme le montre la Figure 2.1, et la présence du relief engendre des phénomènes de subsidence vers la falaise. L'altitude moyenne est de ~ 100 m, avec une pente décroissante vers le nord Ouest, et le couvert végétal est principalement composé de landes et de bocages à l'intérieur des terres.

Sur une altitude de 180 m sur la pointe de La Hague, se situe l'usine de retraitement de combustibles nucléaires¹ usés Orano La Hague (appelée dans la suite Orano), entourée par la mer au nord (~ 4 km) à l'ouest (~ 3 km) et au sud (~ 2 km). Le site d'Orano est constitué d'un enchevêtrement dense de bâtiments (installations industrielles) qui s'étendent environ sur une longueur de 2 km pour 500 m de largeur, et d'une hauteur variant de 10 à 35 m. Ces dimensions, très grandes, de l'infrastructure du site s'ajoutent aux caractères topographiques de la zone et engendrent des ruptures de rugosité importantes susceptibles de favoriser la dispersion d'un panache dans l'atmosphère sous l'effet de la turbulence d'origine mécanique.

Météorologie et climat

Le Nord-Cotentin se caractérise par un climat océanique de type dit « armoricain » (Orano, 2020). Ce climat typiquement atlantique, se caractérise par la prépondérance des influences océaniques avec une faible amplitude thermique, une forte humidité de l'air et des précipitations régulièrement réparties sur l'année. Cependant, la pointe de La Hague connaît la présence d'un microclimat caractérisé par la présence fréquente de brouillards très localisés (qui se produisent souvent dans des situations de vent faible), dû à l'altitude et à la proximité de la mer.

Le site d'Orano dispose d'une station météorologique permettant d'acquérir des mesures continues de plusieurs paramètres météorologiques (eg. vitesse et direction du vent, pluviométrie, température, pression atmosphérique et turbulence de l'air). Ces mesures météorologiques sont utilisées pour avertir les différentes entités du site de l'occurrence d'évènements importants, particulièrement les vents violents et les fortes précipitations.

1. On appelle « combustible nucléaire » un produit sous forme de barres solides, riche en isotopes fissiles, et qui fournit l'énergie au coeur d'un réacteur nucléaire en entretenant la réaction en chaîne de fission nucléaire.

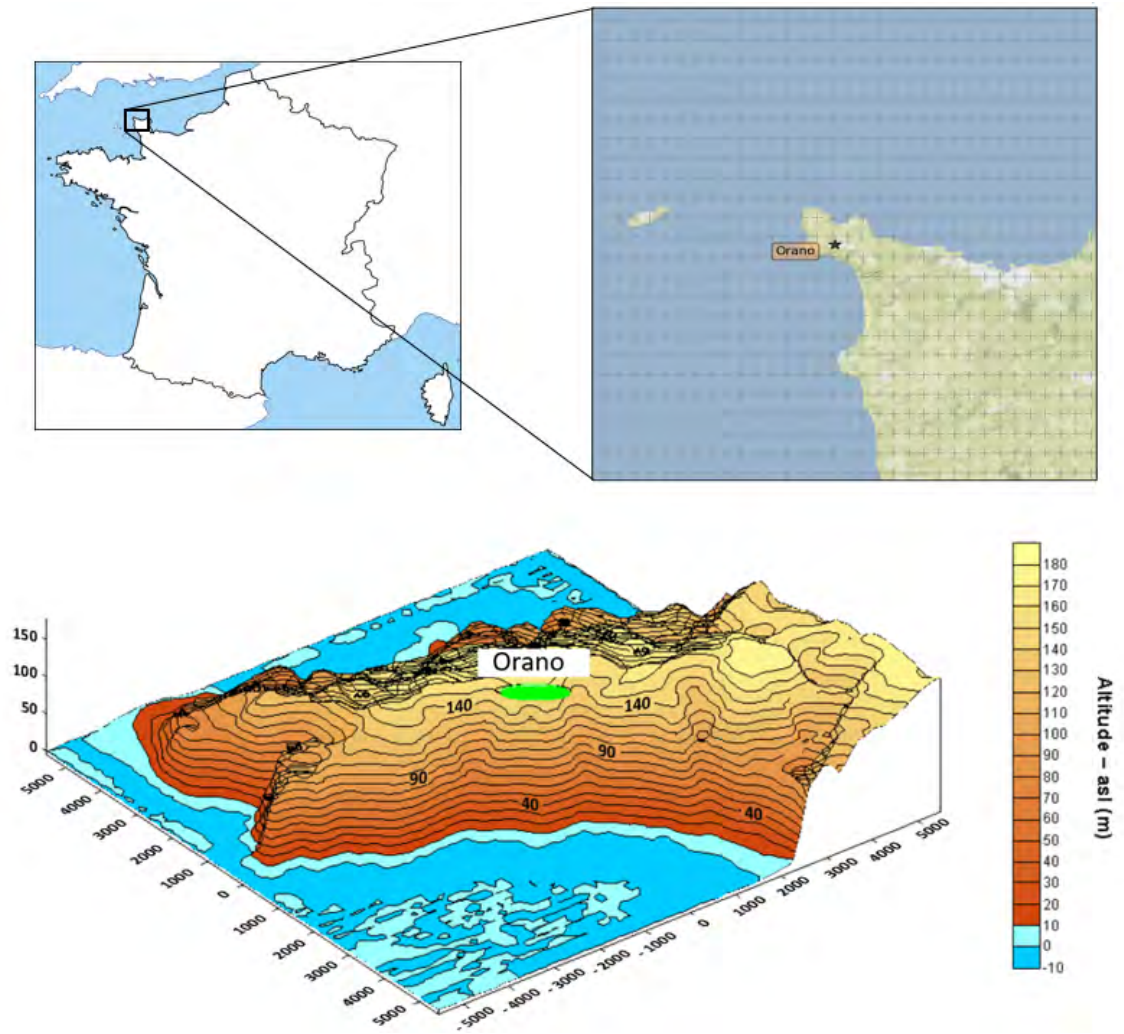


FIGURE 2.1 – En haut à gauche : la position géographique du domaine de calcul sur la carte de France. En haut à droite : le domaine de calcul de la dispersion au nord de la péninsule du Cotentin et la grille météorologique d'AROME dans ce domaine. En bas : la topographie de la pointe de La Hague et la position de l'usine de retraitement du combustibles nucléaire Orano.

	janv.	févr.	mars	avr.	mai	juin	juill.	août	sept.	oct.	nov.	déc.
Vitesse moyenne ($m.s^{-1}$)	11.1	14.5	11.3	7.9	7.9	7.5	6.8	7.1	8.2	11.1	10.7	11.4
Vitesse Maximale ($m.s^{-1}$)	18.0	23.4	16.4	15.8	15.5	13.9	13.8	16.3	18.0	17.5	18.5	18.0

TABLE 2.1 – Vitesses moyennes et maximales mensuelles du vent à 10 m sur le site d’Orano en 2020. Source (Orano, 2020).

Le Tableau 2.1 présente les vitesses moyennes et maximales mensuelles en 2020. On observe que le site connaît souvent des situations de vent fort, avec des vitesses mensuelles moyennes généralement élevées dans la saison hivernale (octobre – février), et des vitesses mensuelles maximales variant entre 13.8 et 23.4 $m.s^{-1}$. Ces conditions du vent, qui sont susceptibles d’accélérer le transport atmosphérique des rejets gazeux, sont produites sous l’effet des caractéristiques géographiques (bord de la mer) et orographiques (relief) de la pointe de La Hague. Par ailleurs, la Figure 2.2 montre les fréquences des directions de vent en 2020 sur le site. On observe que les vents les plus fréquents sont des vents venant soit du sud-ouest (entre 200° et 260°) ou de l’est-nord-est (entre 60° et 80°). Dans les deux cas, les rejets gazeux sont principalement transportés vers la mer.

2.1.2 Domaine de calcul de la dispersion atmosphérique

Étant donné que les présents travaux de thèse s’intéressent en particulier à la dispersion à courtes distances (typiquement inférieures à 20 km) des rejets du ^{85}Kr effectués par l’usine Orano, il est intéressant que le point source définisse le centre du domaine fixé pour le calcul de la dispersion atmosphérique. De plus, il faut éloigner suffisamment les frontières du domaine de simulation, au-delà de 20 km, de façon à éviter que les erreurs numériques (dues au fait que les bouffées qui sortent du domaine ne participent plus aux calculs de concentrations) qui peuvent se produire sur les bords du domaine interviennent dans le rayon d’intérêt. Pour ces raisons, un domaine de 60×60 km centré sur le point source (i.e. Orano) a été défini (Figure 2.1), où les prévisions météorologiques d’AROME ont été interpolées sur une grille cartésienne d’une résolution horizontale de 2.5 km, conduisant à un grille de 24×24 points. Ce processus a été réalisé à l’aide d’un algorithme de post-traitement des prévisions du modèle AROME (c.f., Annexe B) qui a été développé, en langage Python, dans le cadre de ces travaux de thèse. On note que cette étape du post-traitement demande un coût de calcul conséquent à cause des résolutions, spatiale et temporelle, fines des prévisions météorologiques utilisées.

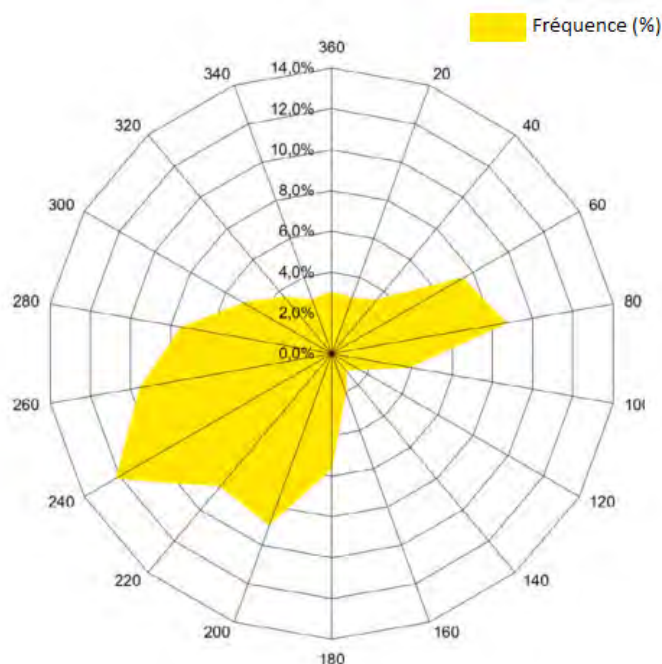


FIGURE 2.2 – Rose des vents représentant les fréquences des directions du vent à 10 m mesuré en 2020 sur le site de Orano. Par définition, la direction du vent est l’angle de sa provenance, et l’angle 0° correspond à un vent de nord. Source (Orano, 2020).

2.2 Description des campagnes expérimentales

Cette partie est consacrée à la description détaillée du traceur atmosphérique utilisé dans ce travail de thèse (^{85}Kr) et de son intérêt potentiel dans le contexte de l’étude, ainsi que des données d’observations, météorologiques et radiologiques, utilisées que ce soit dans le cadre de modélisation ou de validation de la dispersion atmosphérique.

2.2.1 Généralités sur le ^{85}Kr

Caractéristiques physiques

Historiquement, le krypton (Kr) a été découvert par William Ramsay et Morris Travers en 1898, dans les résidus de l’évaporation de l’eau, de l’oxygène, de l’azote, de l’hélium et de l’argon à partir d’un échantillon d’air liquide. Le krypton fait partie des gaz nobles² (ou gaz rares), avec un nombre atomique $Z = 36$. A cause de son inertie chimique, le krypton réagit très peu avec la matière et sa solubilité dans l’eau est très faible (Heim et al., 2010), et par conséquent sa radiotoxicité est également très faible (pas d’effet environnemental ou sanitaire négatif).

Jusqu’à nos jours, 31 isotopes du krypton sont connus, dont 6 sont stables, avec une

2. Hélium (He), Néon (Ne), Argon (Ar), krypton (Kr), Xénon (Xe) et Radon (Rn).

Isotopes stables	Abondance relative (%)
^{78}Kr	0.36
^{80}Kr	2.29
^{82}Kr	11.59
^{83}Kr	11.5
^{84}Kr	56.99
^{86}Kr	17.28

TABLE 2.2 – Abondance relative des différents isotopes stables du krypton dans la nature. Source : Aoki and Makide (2005)

abondance relative³ prédominante de l’isotope ^{84}Kr (Tableau 2.2), et 25 sont radioactifs (instables). Parmi les isotopes radioactifs du krypton, se trouve le krypton-85 (^{85}Kr), découvert en 1943 par Born et Seelmann-Eggebert à la suite de réactions neutroniques avec des sels de rubidium (*Rb*) et de strontium (*Sr*), avec un temps de demi-vie $\tau_{1/2} = 10.7\text{ans}$. Le ^{85}Kr représente un des principaux produits de fission de l’uranium-235 (^{235}U) et du plutonium-239 (^{239}Pu) dans les réacteurs nucléaires, avec un rendement de fission de 0.3%, ce qui veut dire que 3 atomes de ^{85}Kr sont produites par 1000 fissions nucléaires (Katcoff and Rubinson, 1965; Lisman et al., 1971; Nichols et al., 2008). Par ailleurs, la désintégration du ^{85}Kr , de type β^- , donne l’isotope du ^{85}Rb stable. La Figure 2.3 présente le schéma de désintégration du ^{85}Kr . Le mode de désintégration le plus fréquent du ^{85}Kr (avec une probabilité de 99.563%) est par émission de particule β^- (électron chargé négativement), avec une énergie maximale $Q_\beta = 687\text{ keV}$, vers l’état fondamental de ^{85}Rb . Le deuxième mode de désintégration le plus fréquent (avec une probabilité de 0.434%) est par émission β^- d’énergie maximale $Q_\beta = 173\text{ keV}$, suivie par l’émission de rayons γ d’énergie $Q_\gamma = 514\text{ keV}$. D’autres modes de désintégration sont possibles, avec de très faibles probabilités, et dans lesquels des rayons γ moins énergétiques sont émis (Rózański, 1979; Peterson et al., 2007). Le Tableau 2.3 récapitule quelques caractéristiques physiques de l’isotope du ^{85}Kr .

3. L’abondance relative exprime, en pourcentage, la quantité de chaque isotope existant dans la nature pour un élément chimique donné.

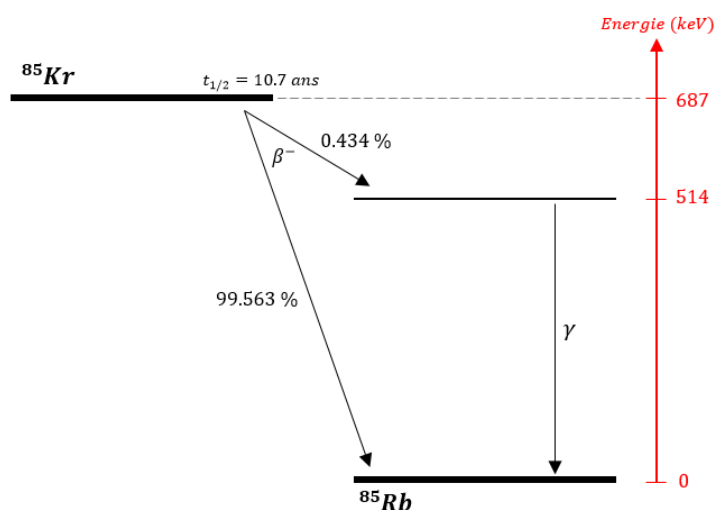


FIGURE 2.3 – Le schéma de désintégration du ^{85}Kr . Les lignes horizontales représentent les niveaux d'énergie en keV.

Symbole atomique	$^{85}_{36}\text{Kr}_{49}$	
Nombre de nucléons (neutrons, protons)	85 (49, 36)	
Masse atomique	84.9125 (u)	
Présence naturelle dans l'environnement	Traces	
Temps de demi-vie	10.7 (ans)	
Rendement de fission	0.3%	
Énergie de liaison par nucléon	8 698.563 (kev)	
Désintégration radioactive	Mode principal	β^-
	Produit	$^{85}_{37}\text{Rb}$
	Energie	687 (kev)

TABLE 2.3 – Récapitulatif de quelques propriétés physiques de l'isotope du ^{85}Kr .

Sources d'émission dans l'atmosphère

Plusieurs sources du ^{85}Kr dans l'atmosphère existent, et on distingue deux types de sources : naturelles et artificielles (anthropiques).

Sources naturelles. Dans les couches hautes de l'atmosphère, le ^{85}Kr d'origine naturelle se présente comme un produit des réactions des neutrons cosmiques avec les isotopes stables du krypton. L'abondance relative des isotopes du krypton, présentée dans le Tableau 2.2, stipule que la réaction la plus dominante est celle de l'isotope ^{84}Kr (Hirota et al., 2004). En outre, des quantités moins faibles du ^{85}Kr sont produites par fission

spontanée de l'uranium et du thorium, dans la croûte terrestre (Rózański, 1979; Hirota et al., 2004; Winger et al., 2005). On note que les quantités de ^{85}Kr produites par ces sources naturelles sont dispersées dans l'atmosphère, et les quantités piégées par le sol et les océans sont négligeables, à cause de l'inertie chimique de ce radionucléide. L'activité de ^{85}Kr d'origine naturelle dans l'atmosphère est estimée à $0.5 \cdot 10^{-3}$ PBq (Ternon, 1990; Connan et al., 2010).

Sources artificielles. On distingue quatre sources anthropiques principales de ^{85}Kr qui sont classées par ordre croissant comme suit :

- Lors du procédé de fabrication du plutonium, utilisé dans l'industrie des armes nucléaires, le ^{85}Kr est rejeté dans l'atmosphère avec une quantité annuelle de l'ordre de $0.5 \cdot 10^{-3}$ PBq (Ternon, 1990), équivalente à la production naturelle.
- On a vu précédemment que le ^{85}Kr est un principal produit de la réaction de fission de ^{235}U et ^{239}Pu dans les cœurs des réacteurs nucléaires opérationnels. En effet, lors de ce processus une petite quantité de ^{85}Kr s'échappe dans l'atmosphère (environ 0.01%), alors que la majorité est retenue dans les parois de la barre du combustible. En 2007, la quantité de ^{85}Kr émise par l'ensemble des réacteurs opérationnels dans le monde est de l'ordre de 0.17 PBq (Ahlsvede et al., 2009).
- Les essais d'armes nucléaires conduisent à la production de quantités importantes de ^{85}Kr dans l'atmosphère. De 1945 à 1990, la quantité annuelle produite par les essais nucléaires est estimée à 74 PBq (Ternon, 1990).
- Les usines de retraitement de combustibles nucléaires usés représentent la source la plus importante de ^{85}Kr dans l'atmosphère. Comme évoqué précédemment, la majeure quantité de ^{85}Kr (environ 99.9%) produit au sein des réacteurs reste piégée dans le combustible. Lors du procédé de recyclage de ce dernier, une petite quantité de ^{85}Kr retenue est rejetée dans l'atmosphère via les effluents gazeux. A la fin de l'année 2007, 12 usines de retraitement de combustibles nucléaires étaient opérationnelles dans 7 pays du monde (France, Royaume-Uni, Russie, Japon, Inde, Pakistan, Israël) (Connan et al., 2010). L'usine Orano La Hague constitue la première source mondiale d'émission de ^{85}Kr dans l'atmosphère. En effet, d'après Ahlsvede et al. (2009), l'ensemble des usines de retraitement dans le monde ont effectué, en 2007, un rejet total d'environ 377 PBq, dont 63% par l'usine Orano La Hague.

En plus de ces sources artificielles principales, des quantités importantes de ^{85}Kr peuvent être libérées dans l'atmosphère lors des accidents nucléaires. À titre d'exemple, pendant l'accident nucléaire de Tchernobyl 1986 en URSS, une quantité de ^{85}Kr d'environ 35 PBq a été libérée dans l'atmosphère (Winger et al., 2005).

Le ^{85}Kr comme traceur de la dispersion atmosphérique

Grâce à son inertie chimique, le ^{85}Kr relâché dans l’atmosphère se caractérise par un taux d’élimination très faible. Ainsi, avec une période radioactive suffisamment longue (10,7 ans), le taux d’élimination du ^{85}Kr par désintégration reste négligeable en champs proches et moyens (inférieurs à quelques dizaines de kilomètres). En outre, grâce à sa faible solubilité dans l’eau, le ^{85}Kr persiste dans l’atmosphère et ne se dépose pas sous l’effet des précipitations. Pour ces raisons, le ^{85}Kr représente un traceur idéal pour la dispersion atmosphérique à courte et moyenne distances. Dans ce contexte, depuis quelques années, quelques études ont déjà utilisé les rejets de ce traceur provenant des usines de retraitement de combustibles nucléaires pour valider les modèles de dispersion atmosphérique (Hill et al., 2005). À l’IRSN, au Laboratoire de Radioécologie de Cherbourg (LRC)⁴, plusieurs études ont été réalisées pour modéliser la dispersion du ^{85}Kr relâché par l’usine Orano, et pour valider les modèles de dispersion en champs proches, typiquement inférieures à 20 km, autour du site de La Hague (Connan et al., 2010; Leroy et al., 2010; Connan et al., 2013, 2014; El-Quartassy et al., 2022).

Dans ce manuscrit, afin d’affiner et de valider les simulations de la dispersion en champs proches, nous utilisons les données du rejet de ^{85}Kr libéré dans l’atmosphère par l’usine Orano et des mesures des activités faites dans l’environnement. Dans la partie suivante, une description détaillée de ces données est présentée.

2.2.2 Terme source du ^{85}Kr

Le terme source signifie le débit du rejet d’un polluant dans l’atmosphère, c’est à dire l’évolution des quantités rejetées de ce polluant au cours du temps (exprimé souvent en $Bq.s^{-1}$). Le terme source constitue une source d’incertitude notable pour les simulations de la dispersion atmosphérique. Cependant, dans ce manuscrit on utilise un terme source connu avec une bonne précision, ce qui nous permet d’étudier les autres sources incertitudes de la dispersion atmosphérique, en particulier celles inhérentes à l’information météorologique utilisée en entrée du modèle de dispersion. Ce terme source correspond aux données de ^{85}Kr , radionucléide relâché dans l’atmosphère par l’usine Orano, lors du procédé de recyclage de combustibles nucléaires usés.

On note que les données de rejet du ^{85}Kr utilisées dans ce manuscrit sont des données à caractère confidentiel, et ne seront pas décrites précisément.

4. Le LRC est un laboratoire de recherche de l’IRSN, situé à Cherbourg En Cotentin à 18 km au Sud-Est de l’usine Orano.

Source	Coordonnées (° déc.) (Latitude, Longitude)	Altitude	Hauteur du rejet	Diamètre du rejet	Température du rejet	Débit Volumique
UP2-800	(49.67705, 1.87941)	180 m	100 m	3 m	30°C	23.6 m.s ⁻¹
UP3	(49.67797, 1.87606)	173 m	100 m	3 m	30°C	30.3 m.s ⁻¹

TABLE 2.4 – Caractéristiques des deux sources d’émission du ⁸⁵Kr, UP2-800 et UP3, de l’usine Orano La Hague. Source : [Leroy \(2010\)](#).

Mécanismes du rejet de ⁸⁵Kr par Orano La Hague

Dans ce paragraphe on présente de façon succincte les mécanismes conduisant à la production du ⁸⁵Kr lors du procédé de retraitement de combustibles nucléaires au sein de l’usine Orano. Pour plus de détails sur ces mécanismes, ainsi que la description détaillée de la chaîne de recyclage de combustibles, le lecteur pourra se référer au rapport [Orano \(2021b\)](#).

Dès qu’il est usé, le combustible nucléaire (contenant 96% de matière recyclable et 4% de déchets ultimes) est stocké dans des piscines de refroidissement à côté du réacteur pendant au moins six mois. Ensuite, il est transporté et déchargé sur le site Orano dans des emballages blindés, et entreposé à nouveau en piscine avant de commencer la chaîne de recyclage. Une fois la période de refroidissement terminée, le combustible est introduit dans une cisaille où les embouts de tête et de pied de l’assemblage combustible (Figure 2.4) sont évacués vers des rinceurs à embouts pour les traiter séparément. Le reste du combustible, contenant la matière nucléaire, est découpé en petits morceaux (appelés les coques) d’environ 35 mm de longueur, ce qui facilite leur dissolution dans l’acide nitrique (HNO₃) bouillant et concentré. L’uranium et le plutonium sont alors extraits conjointement de la solution acide par séparation chimique, laissant derrière eux des déchets de haute activité, principalement sous la forme de produits de fission. Lors de cette étape de dissolution, plusieurs effluents gazeux sont produits, filtrés et rejetés dans l’atmosphère. Pour le ⁸⁵Kr, qui fait partie de ces effluents, il est rejeté régulièrement au niveau des cheminées des deux Unités de Production, appelées UP2-800 et UP3, sur des intervalles de 30 à 45 min séparés de 10 min environ ([Leroy et al., 2010](#); [Connan et al., 2013](#); [El-Ouartassy et al., 2022](#)). Ces deux cheminées sont distantes de 200 m, et leur hauteur de 100 m favorise la dispersion des rejets dans l’atmosphère, et donc la réduction de leur impact potentiel. La surélévation thermocinétique pour ces deux sources peut être considérée comme négligeable devant la hauteur des cheminées, car la température du rejet est d’environ 30°C. Le Tableau 2.4 présente une description des deux émissaires UP2-800 et UP3.

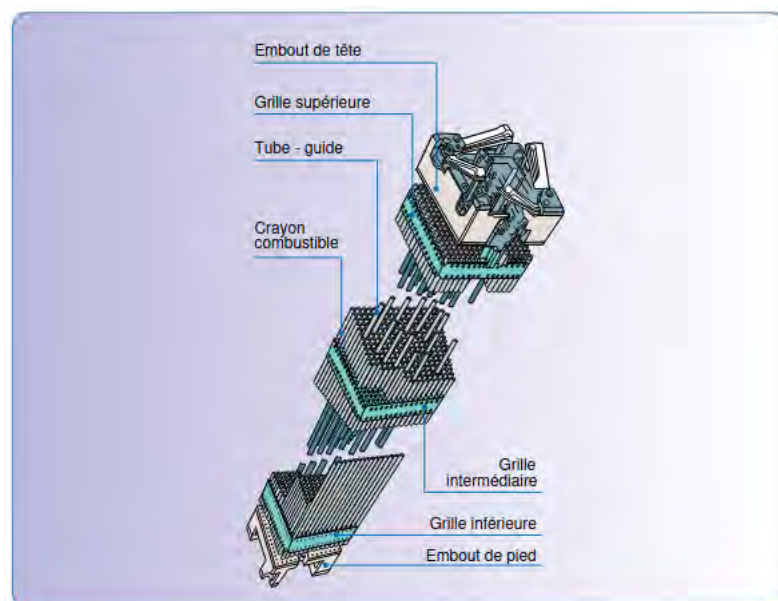


FIGURE 2.4 – Structure d'un assemblage combustible pour un réacteur de type à eau sous pression. Source Orano (2021b).

Mesure du rejet et incertitude associée

Afin de surveiller les quantités des effluents gazeux rejetés dans l'environnement, des mesures périodiques de ces effluents sont effectuées dans les différentes installations du site Orano. En terme de ^{85}Kr , l'activité rejetée par les deux cheminées, UP2-800 et UP3, est mesurée de façon continue, en utilisant une chambre d'ionisation différentielle à circulation de gaz (Orano, 2021a). Le principe de fonctionnement de cette mesure est présenté dans la Figure 2.5. L'air prélevé à l'intérieur d'une cheminée (i.e., source de radiations) circule dans une chambre cylindrique équipée d'électrodes, auxquels est appliquée une tension électrique suffisamment élevée pour permettre la collection complète des ions positifs (sur la cathode) et négatifs (sur l'anode). Ce mouvement des rayonnements ionisants (i.e., électrons et rayons γ) crée un courant électrique, dit courant d'ionisation, qui est mesuré à l'aide d'un électromètre. Ce courant est proportionnel à l'activité du ^{85}Kr présent dans l'air prélevé.

Ces mesures sont réalisées en continu, avec une fréquence temporelle de 10 minutes et une incertitude de mesure de l'ordre de 10% en période de relâchement. Le rejet étant intermittent, le pas de temps de 10 minutes assure une bonne précision aux études de dispersion atmosphérique.

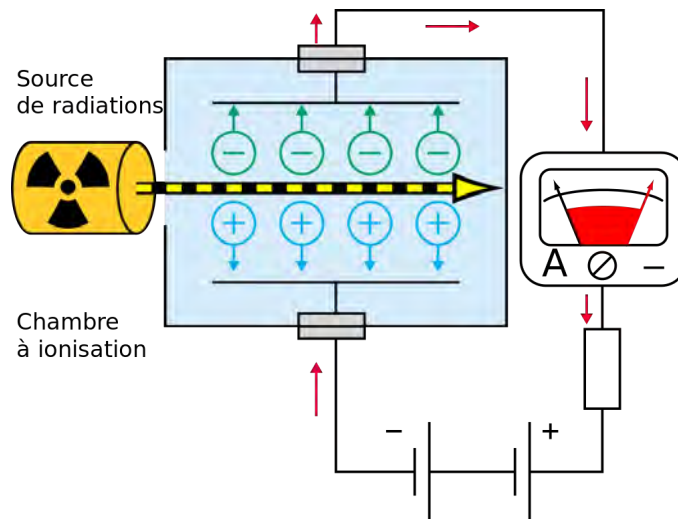


FIGURE 2.5 – Le principe de fonctionnement d’une chambre à ionisation à circulation de gaz, utilisée pour mesurer l’activité radioactive en ^{85}Kr dans les deux cheminées UP2-800 et UP3 de l’usine Orano La Hague.

D’après la décision de l’Autorité de Sûreté Nucléaire (ASN) du 22 décembre 2015, fixant les valeurs limites de rejet dans l’environnement des effluents liquides et gazeux des installations nucléaires en France, le rejet annuel en ^{85}Kr doit être en-dessous de 470 PBq/an. Comme présenté dans la Figure 2.6, de 2016 à 2021, les rejets annuels de ^{85}Kr effectués par l’usine Orano ont varié de 285 à 379 PBq/an (Orano, 2018, 2020, 2021a).

2.2.3 Observations météorologiques

Dans le contexte de ces travaux de thèse, les observations météorologiques *in-situ* sont utilisées pour la validation des prévisions météorologiques dédiées au calcul de la dispersion atmosphérique. Autrement dit, avant d’utiliser les ensembles PEARO pour calculer les prévisions de la dispersion, il a été indispensable d’évaluer leur qualité dans la zone d’étude, dans le but de juger de la nécessité, ou non, d’une éventuelle étape préliminaire de calibration⁵ de ces ensembles.

Plusieurs études précédentes ont montré que, pour les polluants qui ne sont pas lessivés (sous l’effet des précipitations), les champs 3D du vent (en terme de vitesse et direction) représentent l’un des paramètres météorologiques les plus cruciaux et influents pour les modèles de dispersion (Girard et al., 2014). Ainsi, dans ce travail, la performance des prévisions d’ensemble PEARO a été évaluée par rapport aux observations *in-situ* de vitesse et de direction du vent dans le Nord-Cotentin. Pour ce faire, on dispose de cinq sources de mesures météorologiques dans cette zone, à différentes distances et orientations autour de

5. C’est un ensemble de techniques statistiques fréquemment utilisées pour enlever les biais ou la sur/sous-dispersion importants, s’ils existent, dans les prévisions d’ensemble.

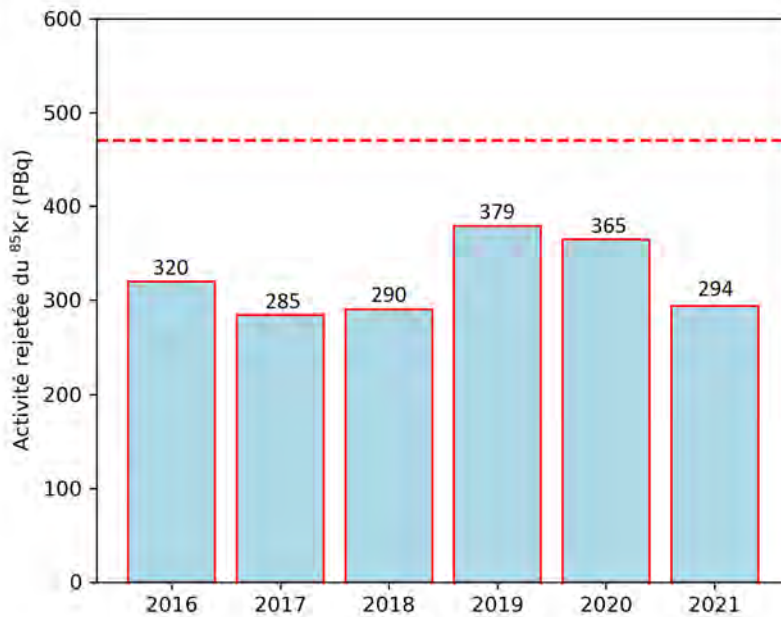


FIGURE 2.6 – Les activités annuelles du ^{85}Kr libéré dans l’atmosphère par l’usine Orano La Hague, de 2016 à 2021. La ligne horizontale en pointillés indique le seuil annuel maximal autorisé (470 PBq/an), d’après la décision de l’ASN du 22/12/2015.

l’usine Orano (Figure 2.8). Ces mesures peuvent être classées en deux types : (i) mesures au sol et (ii) et profil vertical.

Observations du vent au sol

Le réseau RADOME de Météo-France. Météo-France dispose d’un réseau, appelé RADOME, d’acquisition d’observations au sol de plusieurs variables météorologiques (vent, température, pression, rayonnements, humidité, etc.). Ce réseau comprend environ 550 stations automatiques de mesures en temps réel, réparties sur tout le territoire Français, avec des fréquences de mesure variant d’une minute à une heure. Ainsi, dans ce manuscrit, les observations horaires du vent à 10 m dans les deux stations RADOME incluses dans la zone d’intérêt sont utilisées : La Hague (1.9398° W, 49.7251° N) et Gonneville (1.4635° W, 49.6526° N) situées, respectivement, à ~ 2.5 km et ~ 31 km de l’usine Orano. Les mesures de vent sont réalisées, en continu, dans ces deux stations à l’aide d’un anémomètre mécanique associé d’une girouette. Le principe de fonctionnement de cet instrument s’appuie sur l’utilisation de l’énergie cinétique du vent horizontal pour déduire la vitesse et la direction du vent.

Mesures ultrasoniques du LRC. En plus des observations au sol du réseau RADOME de Météo-France, des observations par anémomètre ultrasonique du LRC ont été aussi mises à disposition. Cet instrument a été installé sur le toit du LRC (1.6458° W, 49.6347° N), à une hauteur de 13 m du sol, et fournit des mesures de vent en temps réel, avec une résolution temporelle de 10 min. La mesure de vent par un anémomètre ultrasonique est basée sur la mesure du temps de trajet d’ondes ultrasoniques (ondes acoustiques) dans l’air.

Observations du profil vertical du vent

Étant donné que nous nous intéressons principalement à la dispersion atmosphérique à courte distance, le transport des particules rejetées dans l’atmosphère se fait, généralement, à l’intérieur de la couche limite. Cela explique pourquoi nous allons évaluer les prévisions PEARO non seulement près du sol, mais aussi à plusieurs niveaux verticaux de la couche limite.

Acquisition par Lidar Doppler. Le Lidar (LIght Detection And Ranging) est un capteur de mesures à distance par laser. C’est un instrument de sondage atmosphérique utilisant des ondes électromagnétiques optiques qui peuvent aller de l’ultraviolet à l’infrarouge. Les Lidars atmosphériques servent à la surveillance du climat, de la qualité de l’air ou encore des nuages (Werner, 2005; Wu et al., 2022). Certains Lidars peuvent mesurer la vitesse et la direction du vent sur plusieurs niveaux verticaux, à partir de la mesure, via l’effet Doppler⁶, de la vitesse de déplacement des particules et molécules atmosphériques.

Dans le cadre de ces travaux de thèse, un Lidar Doppler, version Leosphere Windcube 2 (Figure 2.7), a été installé par le LRC sur le site de la Plateforme Technique Instrumentée de La Hague (PTILH) (1.8733° W, 49.6949° N) situé à ~ 2 km au nord de l’usine Orano. Depuis son installation, ce Lidar fournit des mesures de vitesse et direction du vent, au pas de 10 min, sur 13 niveaux verticaux, de 40 m à 260 m avec un pas de 20 m.

Aquisition par Sodar. Le Sodar (Sonic Detection And Ranging) est un appareil de télédétection, utilisé souvent en météorologie, pour l’acquisition tridimensionnelle des champs de vent (vitesse et direction) et de la température sur plusieurs niveaux verticaux. Au contraire du Lidar qui utilise des ondes lumineuses (laser), le Sodar utilise l’effet Doppler sur des ondes sonores (Tamura et al., 2001).

Dans le cadre d’un partenariat entre Météo-France et Électricité de France (EDF), les mesures du vent issues du réseau d’observations SEMENCE ont été mises à disposition.

6. C’est le décalage de la longueur d’onde électromagnétique rétrodiffusée par le récepteur (particules et molécules atmosphériques) et reçue par l’émetteur (lidar), lorsque la distance entre les deux varie au cours du temps.



FIGURE 2.7 – Photographie du Lidar Doppler (version Leosphere Windcube 2) installé dans la station PTILH, et utilisé dans ce manuscrit.

SEMENCE, dont EDF est majoritairement propriétaire, est un dispositif technique qui collecte les données d’observations météorologiques sur les sites nucléaires en France, (y compris Orano La Hague), à partir des instruments Sodar qui y sont installés.

Dans ce manuscrit, les observations du vent du Sodar installé sur le site d’Orano (1.8901° W, 49.6800° N), sont utilisées. Elles fournissent des mesures horaires de la vitesse et de la direction du vent à cinq niveaux verticaux : 0, 10, 50, 100 et 150 m.

Le Tableau 2.5 récapitule la description des stations d’observations du vent utilisées pour la validation météorologique des prévisions d’ensemble PEARO.

2.2.4 Mesures expérimentales du ^{85}Kr : le projet DISKRYNOC

Dans le cadre d’un partenariat de recherche et d’études, le service environnement d’Orano et le LRC de l’IRSN ont établi des accords, depuis de nombreuses années. Dans ce cadre, des mesures de ^{85}Kr sont réalisées périodiquement autour du site d’Orano à plusieurs distances (projet AEROSTAT, [Connan et al. \(2014\)](#)). Ces mesures sont utilisées également pour confronter les modèles de dispersion de l’IRSN au cas d’une zone rocheuse à orographie complexe, telle que la pointe de La Hague, et pour différentes conditions atmosphériques ([Maro et al., 2002](#); [Leroy et al., 2010](#); [Connan et al., 2013](#); [El-Quartassy](#)

Stations	Propriétaire	Distance du site Orano	Instrument de mesure	Fréquence	Niveaux verticaux d'acquisition
La Hague	Météo-France	2.5 km	Anémomètre mécanique	1 h	10 m
Gonneville	Météo-France	31 km	Anémomètre mécanique	1 h	10 m
LRC	IRSN-LRC	18 km	Anémomètre ultrasonique	10 min	13 m
PTILH	IRSN-LRC	2 km	Lidar	10 min	[40 – 60 m] avec un pas de 20 m
Orano	Orano	0 km	Sodar	1 h	[0, 10, 50, 100, 150 m]

TABLE 2.5 – Récapitulatif des différentes stations de mesures 3D du vent utilisées dans ce manuscrit pour la validation des prévisions d'ensemble PEARO au Nord-Cotentin.

et al., 2022). Grâce à cette collaboration entre les deux institutions, le projet DISKRYNOC (DISpersion du KRYpton au Nord-Cotentin) a vu le jour.

Le projet DISKRYNOC, principalement mené par le LRC, vise à mettre en place une base de données, originale, récente et complète de mesures continues de l'activité volumique du ^{85}Kr , en champs proches et moyens (0-30 km) autour de l'usine Orano. Pour ce faire, des échantillonnages continus de l'air ont été réalisés, dans une dizaine de points sur différentes distances et orientations autour du site d'Orano, depuis mi-novembre 2020 jusqu'en décembre 2022. Cette période prolongée devrait permettre d'obtenir un nombre significatif d'observations sur tous les sites de mesures, en compensant les périodes sans activité de retraitement (absence du rejet) ou avec une direction de vent non favorable à un signal aux stations de mesures.

Dans ce manuscrit, les observations radiologiques de la campagne DISKRYNOC sont utilisées pour obtenir un retour d'expérience sur l'utilisation des ensembles météorologiques à fine-échelle pour quantifier les incertitudes associées, dans les simulations de la dispersion atmosphérique. Dans la littérature, il y a peu d'études expérimentales qui ont été faites sur la mesure des traceurs atmosphériques pour des distances allant de 2 à 20 km. Pour cette raison, nous utilisons les huit stations DISKRYNOC les plus proches de l'usine Orano, et qui sont incluses dans un rayon de 20 km (Figure 2.8 et Tableau 2.6) : PTILH, Urville, Ludiver, Octeville, LRC, Digulleville, Beaumont et Gréville. L'IRSN est propriétaire des cinq premières stations où les mesures sont effectuées toutes les minutes, tandis que les trois dernières sont des stations d'Orano où les mesures sont effectuées toutes les 10 minutes. Les valeurs typiques des concentrations atmosphériques du ^{85}Kr dans ces stations varient de quelques dizaines à des milliers de $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$, en fonction de la distance par rapport à la source, de la direction du vent, des activités de retraitement de



FIGURE 2.8 – Carte des sites d’observations, météorologiques et radiologiques, autour de l’usine Orano La Hague (indiquée par une étoile). Les cercles indiquent les emplacements des sites de mesure du vent (de l’IRSN ou de Météo-France). Les points et les carrés indiquent les emplacements des stations de mesure du ^{85}Kr réalisées, respectivement, par l’IRSN et Orano dans le cadre de la campagne DISKRYNOC.

l’usine et des conditions atmosphériques (Connan et al., 2013, 2014; El-Ouartassy et al., 2022).

Les mesures de l’activité volumique du ^{85}Kr dans le cadre du projet DISKRYNOC, sont calculées par un compteur β proportionnel Berthold LB123 ou LB134 (Figure 2.10), rempli de gaz et étalonné pour permettre de convertir les impulsions, en coups par seconde, en $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$. Cette méthode n’est utile que dans les champs proches (moins de 30 km) où la concentration de ^{85}Kr dans l’air est suffisamment élevée pour être mesurable par cette technique. Pour une documentation plus détaillée sur cette méthode, le lecteur pourra se référer au travaux de Gurriaran et al. (2004) et Connan et al. (2014). L’appareil d’échantillonnage de l’air est connecté à un ordinateur permettant l’acquisition en continue des mesures. L’ensemble est installé dans un abri de protection suffisamment aéré, comme le montre la Figure 2.9 pour l’appareil installé sur la station de mesure de Ludiver.

Au final, pour tenir compte de l’incertitude de mesure, et du bruit de fond variable d’un site à l’autre, un seuil de concentration de $1545 \text{ Bq}\cdot\text{m}^{-3}$ a été déterminé par les opérateurs. Les pics observés en $\text{Bq}\cdot\text{m}^{-3}$ ne sont donc considérés avec certitude comme du ^{85}Kr qu’à partir de cette activité de $1545 \text{ Bq}\cdot\text{m}^{-3}$.

Stations	Coordonnée (° déc.) (Latitude, Longitude)	Propriétaire	Hauteur de mesure	Distance de la source	Résolution temporelle
PTILH	(49.6949, 1.8733)	IRSN	1.5 m	2 km	1 min
Urville	(49.6607, 1.7431)	IRSN	1.5 m	10.4 km	1 min
Ludiver	(49.6297, 1.7283)	IRSN	1.5 m	12.7 km	1 min
Octeville	(49.6211, 1.6579)	IRSN	1.5 m	17.7 km	1 min
LRC	(49.6374, 1.6485)	IRSN	2 m	18 km	1 min
Digulleville	(49.7001, 1.8595)	Orano	2 m	2.6 km	10 min
Beaumont	(49.6613, 1.8358)	Orano	2 m	4.2 km	10 min
Gréville	(49.6682, 1.8097)	Orano	2 m	5.2 km	10 min

TABLE 2.6 – Description des huit stations DISKRYNOC, pour les mesures continues de la concentration atmosphérique de ^{85}Kr , utilisées dans ce manuscrit.



FIGURE 2.9 – Station de mesures continues de la concentration atmosphérique du ^{85}Kr sur le site de Ludiver, dans le cadre de la campagne DISKRYNOC. L’abri de protection des dispositifs est composé de deux parties : une partie supérieure fermée, permettant de protéger l’ordinateur et la batterie, et une partie inférieure aérée vers laquelle est orientée la fenêtre de comptage.



FIGURE 2.10 – Compteur β proportionnel Berthold LB134, utilisé pour le calcul de l'activité volumique du ^{85}Kr dans la station LRC.

2.2.5 Périodes d'étude

On distingue deux périodes d'étude dans ces travaux de thèse : (i) une période de validation de la dispersion atmosphérique et (ii) une période de validation météorologique.

La période de validation de la dispersion atmosphérique est déterminée après le traitement des séries temporelles des observations radiologiques dans les différents sites de mesures. Afin de s'abstraire des périodes d'absence de rejet et des périodes où le panache se disperse vers la mer, nous avons sélectionné trois périodes où le passage du panache de ^{85}Kr a été détecté sur la majorité des sites (Tableau 2.7). Après leur agrégation, ces périodes construisent un ensemble total de 30 jours, qui sera pris comme période de modélisation et de validation de la dispersion atmosphérique. Cette période est équivalente à un mois avec une grande densité d'événements de dépassements de seuil (408 pics). Cette situation est représentative d'une phase postérieure à un accident nucléaire. En dehors de ces travaux de thèse, qui se sont focalisés sur la période 12/2020–02/2021, d'autres périodes pourront être extraites de la base de données qui contient des mesures jusque décembre 2022.

La période de validation météorologique, quant à elle, est définie de façon à ce qu'elle soit suffisamment longue pour assurer la représentativité statistique des scores d'évaluation, et de façon à ce qu'elle soit représentative de la période de validation de la dispersion atmosphérique. Ainsi, les ensembles PEARO ont été évalués sur une période de trois mois

Périodes	08–15/12/2020	26–30/12/2020	07–26/01/2021	Total
Nombre de pics observés	116	92	200	408 pics/30 jours

TABLE 2.7 – Les périodes d’étude considérées dans ces travaux de thèse, dans le cadre de la modélisation et de la validation de la dispersion atmosphérique.

allant du 01 décembre 2020 jusqu’au 28 février 2021.

2.3 Le modèle déterministe AROME et la Prévision d’Ensemble AROME (PEARO)

La Prévision d’Ensemble AROME (Bouttier et al., 2016, PEARO) est devenu opérationnel à Météo-France en 2016. La PEARO est basée sur le modèle AROME (Applications de la Recherche à l’Opérationnel à Méso-Échelle) de Météo-France, qui a été mis en opérationnel en 2008. Ainsi, avant d’aborder la description de la PEARO, on propose en premier lieu une description succincte du modèle de base AROME.

2.3.1 Le modèle AROME

AROME est le modèle opérationnel de prévision numérique du temps à échelle kilométrique, de Météo-France. Il s’agit d’un modèle spectral à la dynamique non hydrostatique. Ce modèle couvre un domaine géographique, d’environ 1000×1000 km centré sur le territoire français, couvrant une partie des pays adjacents (Figure 2.12). Jusqu’en 2015, AROME fonctionnait sur une grille de résolution horizontale de 2.5 km et 60 niveaux verticaux. En 2015, la résolution horizontale d’AROME a été raffinée à 1.3 km, et la résolution verticale est passée à 90 niveaux allant de la surface jusqu’à la haute troposphère (Brousseau et al., 2016).

Étant un modèle à aire limitée, AROME est couplé au modèle de prévision global opérationnel ARPEGE⁷ (Courtier et al., 1991), afin de fournir les conditions aux limites latérales et supérieures. AROME est lancé quatre fois par jour jusqu’à au moins 42 heures d’échéance, à partir des heures initiales 00 h, 06 h, 12 h et 18 h UTC (appelées dans la suite les réseaux de prévision d’AROME). Par ailleurs, afin de fournir les états initiaux des prévisions, AROME est doté d’un schéma d’assimilation de données, de type 3D-var, qui produit des analyses à une résolution de 1.3 km en corrigeant l’état du modèle au pas de temps horaire à l’aide de différents types d’observations météorologiques : (i) données

7. Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle

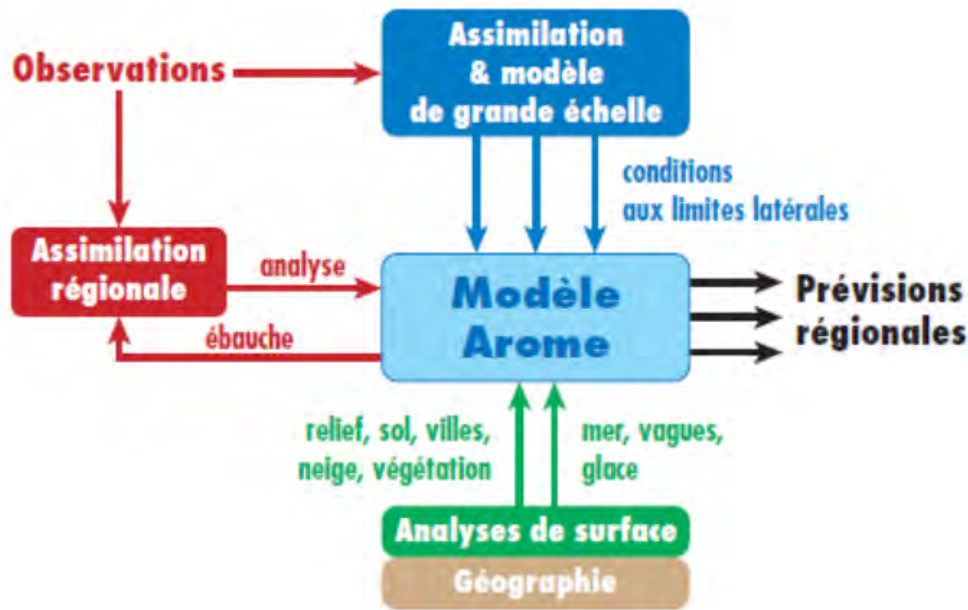


FIGURE 2.11 – Schéma de fonctionnement du modèle AROME. Source [Bouttier \(2007\)](#).

conventionnelles (in-situ, sol, avions et radiosondages), (ii) données des radars (réflectivité et vent Doppler) et (iii) données satellitaires (radiances et autres données). Le forçage des conditions de surface est fourni par le modèle SURFEX (SURFace EXternalisée ; [Masson et al., 2013](#)).

La Figure 2.11 montre les différentes sources d'informations et les processus nécessaires au fonctionnement du modèle AROME, et le Tableau 2.8 reprend ses caractéristiques générales. Pour une documentation exhaustive de ce modèle, le lecteur pourra se référer à l'article de [Seity et al. \(2011\)](#).

2.3.2 Le système de Prévision d'Ensemble AROME (PEARO)

La première version opérationnelle de la PEARO a vu le jour à l'automne 2016 ([Bouttier et al., 2016](#)). Cette première version se composait de 12 membres, avec deux lancements par jour à 09 h et 21 h UTC (appelés dans la suite les réseaux de prévision de la PEARO), et fonctionnait sur le même domaine géographique que AROME avec une résolution horizontale de 2.5 km et 90 niveaux verticaux. Dès lors, la PEARO a bénéficié de plusieurs améliorations résumées dans Figure 2.13. Dans la suite, on se focalise sur la version PEARO utilisée dans ces travaux de thèse, et qui a été opérationnelle pendant trois ans, de juillet 2019 à juin 2022 (2.13).

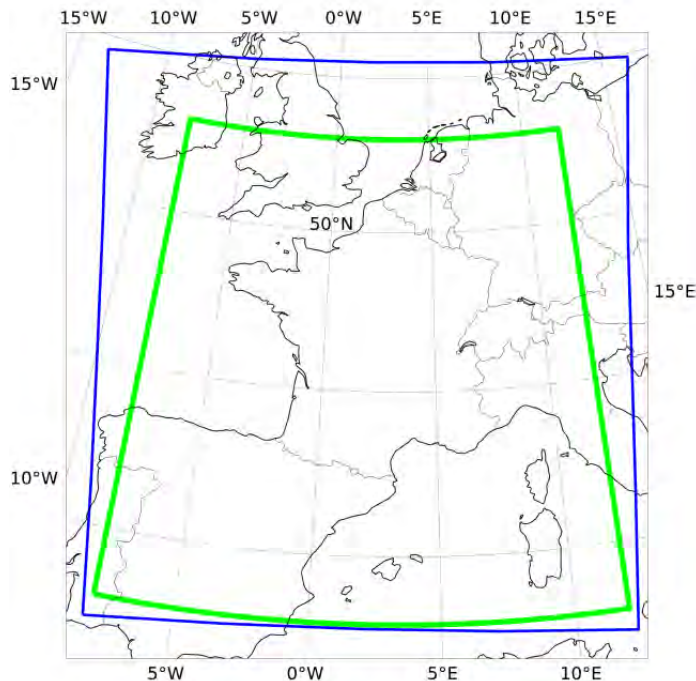


FIGURE 2.12 – Le domaine géographique couvert par AROME. Le cadre extérieur (en bleu) est le domaine de calcul du modèle. Le cadre intérieur (en vert) est le domaine de sortie (post-traitement) de la version de AROME utilisée dans le présent manuscrit. Ces domaines sont les mêmes pour la PEARO. Source : [Bouttier and Raynaud \(2018\)](#).

2.3.3 La version utilisée de la PEARO

Caractéristiques générales

Le Tableau 2.8 récapitule les caractéristiques générales de la PEARO utilisée dans ce manuscrit. L'ensemble comporte 16 membres, avec au moins 45 heures d'échéance pour quatre réseaux de prévision par jour : 03 h, 09 h, 15 h et 21 h UTC. Le domaine de calcul de la PEARO (cadre bleu dans la Figure 2.12) est défini par une grille régulière de 2.5 km de résolution sur une projection de Lambert. Un post-traitement (documenté dans l'article de [Seity et al., 2011](#)) est effectué ensuite sur une grille régulière latitude-longitude d'une résolution de 0.025° (cadre vert dans la Figure 2.12). Les champs sont calculés sur cette grille de sortie, sur des niveaux hauteur (par rapport au sol ou au niveau de la mer) ou sur des niveaux isobares. Ces champs servent, dans l'étude, au forçage du modèle de dispersion.

Prise en compte des incertitudes

Afin de prendre en compte les différentes sources d'incertitudes, on introduit diverses perturbations dans les 16 membres PEARO : conditions initiales, conditions aux limites latérales, conditions de surface et paramétrisations physiques.

Conditions initiales. On a vu dans le chapitre précédent que, à cause du caractère chaotique de l'atmosphère et de la sensibilité des prévisions aux conditions initiales, il n'est pas possible de déterminer avec certitude l'évolution de l'atmosphère dans le futur.

Dans le cas de la PEARO, pour estimer l'incertitude initiale, 16 conditions initiales perturbées sont construites à partir de l'Assimilation d'Ensemble AROME (AEARO), mise en opérationnel depuis juillet 2018. L'AEARO est un ensemble de 25 membres de 3.25 km de résolution (Raynaud and Bouttier, 2016). Ces membres sont obtenus en perturbant les observations selon une distribution Gaussienne ainsi que l'état du modèle (Brousseau et al., 2011), pendant le processus d'assimilation.

Pour obtenir les 16 états initiaux pour PEARO, 16 membres AEARO parmi les 25, notés $\tilde{x}_{a,i}$, sont sélectionnés aléatoirement puis 16 perturbations initiales sont définies par $\tilde{x}_{a,i} - \langle x_a \rangle$, où $\langle x_a \rangle$ est la moyenne des 16 états AEARO. Ces perturbations sont ensuite ajoutées à l'analyse 3D-var d'AROME (x_a^{ARO}) pour construire les 16 conditions initiales de la PEARO ($x_{a,i}^{PEARO}; i = 1, 2, \dots, 16$) :

$$x_{a,i}^{PEARO} = x_a^{ARO} + \tilde{x}_{a,i} - \langle x_a \rangle. \quad (2.1)$$

Conditions aux limites latérales et supérieures. Comme pour AROME déterministe, la PEARO étant un système à aire limitée, il est nécessaire de lui associer un modèle coupleur ayant une échelle plus grande. Les membres PEARO sont couplés à la Prévision d'Ensemble ARPEGE (PEARP; Descamps et al., 2015). Depuis son développement en 2004 à Météo-France, la PEARP a connu plusieurs évolutions visant à améliorer sa performance. Dans sa version opérationnelle de 2021, utilisée dans ces travaux, la PEARP a une résolution horizontale qui varie entre ~ 11 km au-dessus de la France et ~ 36 km aux antipodes. L'ensemble PEARP est composé de 35 membres, dont un membre de contrôle non perturbé, et fournit des prévisions horaires allant jusqu'à 108 heures d'échéance.

Ainsi, pour définir les conditions aux bords du domaine, chaque membre PEARO est couplé à un membre PEARP différent. Dans la mesure où les deux ensembles n'ont pas le même nombre de membres, une méthode de classification non-supervisée est appliquée pour sélectionner les 16 membres PEARP qui sont associés aux membres PEARO. Ce processus est documenté dans l'article de Bouttier and Raynaud (2018).

Conditions de surface. A l'échelle kilométrique, les interactions surface-atmosphère jouent un rôle crucial pour la prévision du temps, et cela d'autant plus dans le cas d'évé-

	AROME	PEARO
Domaine	Europe de l'Ouest, centré sur la France ($\sim 1000 \times 1000$ km)	
Taille	1 prévision (déterministe)	16 membres
Niveaux verticaux	90 [5 m – 10 hPa]	90 [5 m – 10 hPa]
Résolution horizontale	1.3 km	2.5 km
Fréquence des sorties	1 h	1 h
Réseaux de prévision	0000, 0600, 1200, 1800 UTC	0300, 0900, 1500, 2100 UTC
Échéances	48 h, 42 h, 48 h, 42 h	45 h, 51 h, 45 h, 51 h
Conditions initiales	Assimilation 3D-var	3D-var et AEARO
Conditions aux bords	ARPEGE	PEARP + clustering
Conditions de surface	SURFEX	Perturbations de certains paramètres de surface
Erreurs de modélisation	–	SPPT

TABLE 2.8 – Comparaison générale des caractéristiques du modèle AROME et sa version ensembliste PEARO.

nements extrêmes (e.g précipitations convectives et tempêtes). Ainsi, la représentation de l'incertitude dans les conditions de surface de la PEARO est faite via la perturbation de certaines variables comme la température de surface (continent et mer) ou l'humidité de surface. La façon dont ces perturbations sont mises en place est documentée dans l'article de [Bouttier et al. \(2016\)](#).

Erreurs de modélisation. Les incertitudes des prévisions proviennent également du modèle lui-même qui n'est pas parfait. Pour tenir compte de ces incertitudes, plusieurs approches existent dans la littérature ([Wimmer, 2021](#)). Pour la PEARO, la méthode SPPT ([Palmer et al., 2009](#); [Bouttier et al., 2012](#); [Wastl et al., 2019](#)) est utilisée. On rappelle que cette méthode consiste à ajouter des perturbations aléatoires aux tendances de la physique du modèle, notamment pour le vent, la température et l'humidité dans le cas de la PEARO. Finalement, le Tableau 2.8, résume les caractéristiques principales de la PEARO utilisée dans ce manuscrit.

2.3.4 Dernière version de la PEARO (version non utilisée)

Comme pour tous les systèmes de PNT à Météo-France, des améliorations de la PEARO sont effectuées régulièrement. La dernière version a été mise en opérationnel en juillet 2022, avec le raffinement de la résolution horizontale à 1.3 km, et la synchronisation avec AROME déterministe (passage aux mêmes échéances de prévision qu'AROME). Cette synchronisation permet de considérer AROME comme membre de contrôle de la PEARO, et conséquemment la PEARO actuelle est composée de 17 membres. La Figure 2.13 résume les principales évolutions que la PEARO a connues depuis la première

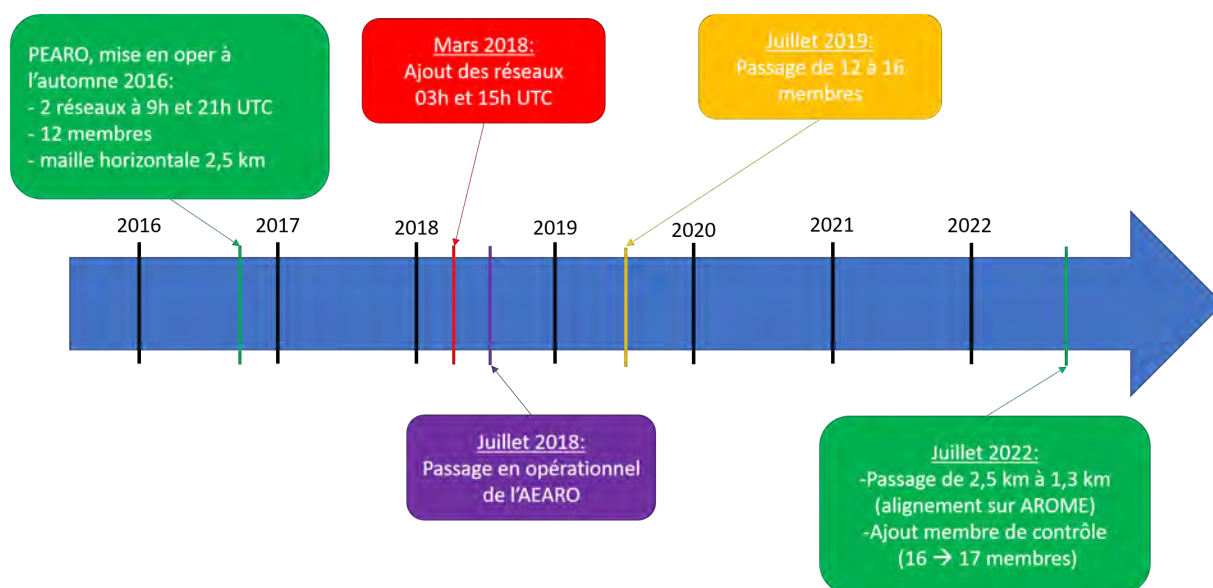


FIGURE 2.13 – Chronologie des principales évolutions de la prévision d'ensemble PEARO depuis sa mise en opérationnel pour la première fois en 2016 jusqu'au 2022. Source [Mounier \(2022\)](#).

version en 2016 jusqu'à la version actuelle.

2.4 Le modèle pX et ses applications

2.4.1 Généralités

Le modèle pX est un code de dispersion atmosphérique à bouffées gaussiennes qui fait partie de la plateforme opérationnelle C3X ([Tombette et al., 2014](#)) développée par l'IRSN et utilisée par le Centre Technique de Crise (CTC) de l'Institut en situation d'urgence radiologique. En 2008, la première version de ce modèle ([Soulhac and Didier, 2008](#)) a été développée dans le cadre d'une collaboration entre l'équipe BMCA⁸ de l'IRSN et le laboratoire LMFA⁹ de l'École Centrale de Lyon. Dès lors, les modèles physiques de pX ont évolué, à la fois pour introduire des améliorations conformes à l'état de l'art et pour mieux répondre aux évolutions des besoins. Le modèle pX était historiquement utilisé pour obtenir un ordre de grandeur des distances au-delà desquelles des actions de protection des populations seraient recommandées. Ces évaluations de dose étaient faites suivant des hypothèses réputées conservatrices en considérant une météorologie homogène et un rejet proche du sol. L'hypothèse de météorologie constante et homogène étant suffisante dans

8. Bureau de Modélisation des transferts dans l'environnement pour l'étude des Conséquences des Accidents.

9. Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique.

la mesure où les distances obtenues pour les scénarios considérées sont inférieures à 10 kilomètres.

Le développement des évaluations dites « post-accidentelles », prenant en compte non seulement les conséquences à court terme sur les populations mais également les conséquences à plus long terme, incluant la contamination des denrées alimentaires notamment, a impliqué d'étendre le domaine de validité de pX et de revoir ainsi certaines hypothèses ; la catastrophe de Fukushima suivant le séisme et le tsunami de mars 2011 au Japon a confirmé le besoin d'étendre le domaine d'utilisation de pX, notamment en utilisant une météorologie variable en espace issue de modèles de prévision météorologique (Mathieu et al., 2012; Korsakissok et al., 2013). Dès lors, le modèle pX a évolué afin de mieux prendre en compte le transport et la diffusion des polluants au sein d'une météorologie hétérogène, jusqu'à plusieurs dizaines de kilomètres (80 km dans le cas de Fukushima), en introduisant notamment :

1. la possibilité d'éclater une bouffée devenue trop grande pour vérifier l'hypothèse de météorologie homogène en bouffées plus petites vérifiant cette hypothèse (scission des bouffées) ;
2. l'introduction d'écart-types de dispersion basés sur une représentation continue de l'atmosphère, dits de la similitude ;
3. une meilleure prise en compte des interactions avec la couche limite atmosphérique instationnaire ;
4. Le calcul de l'élévation du centre de gravité du panache, permettant de prendre en compte la météorologie au centre réel de la bouffée pour calculer son advection et sa diffusion.

La Figure 2.14 reprend ces différentes évolutions du modèle pX, depuis la première version en 2008, jusqu'à la dernière version 2.0 en 2019. Cette dernière version est celle utilisée dans ce manuscrit.

Dans la suite de cette partie, on propose une description concise de la physique du modèle pX, en particulier les parties intéressantes pour le cas étudié dans le présent manuscrit. En revanche, le rapport Korsakissok et al. (2019) présente une documentation détaillée et complète de la physique de ce modèle, notamment sa dernière version, ainsi que les différentes améliorations apportées par rapport aux versions antérieures.

2.4.2 Interaction avec le sol et le sommet de la CLA

Pour le modèle pX, les données de la hauteur de la CLA sont des données d'entrée, définies sur une grille 2D. Ces données sont utilisées pour modéliser la réflexion du panache dans la couche d'inversion (généralement le sommet de la CLA) et le sol, qui ont un « effet

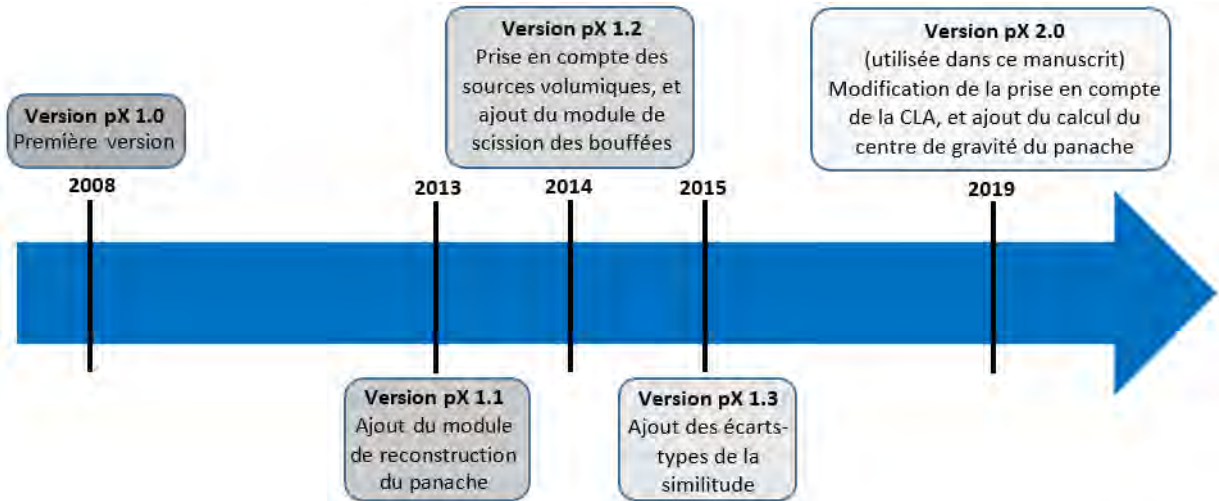


FIGURE 2.14 – Chronologie des principales évolutions du modèle pX depuis sa première version développée en 2008 jusqu'à la dernière version développée en 2019, qui est utilisée dans ce manuscrit. La liste des différentes modifications dans chaque version n'est pas exhaustive.

couvercle » sur le panache. Pour ce faire, *la méthode des images*, présentée dans la Figure 2.15, est implémentée. Le principe de cette méthode est d'ajouter une source virtuelle symétrique de la source réelle par rapport au sol ou par rapport à la base d'une couche d'inversion, dès que le panache rencontre l'une des ces deux parois. Ainsi, la concentration en un point de l'espace est égale à la somme de la contribution de toutes les sources.

Lorsque la diffusion d'une bouffée est effectuée à l'intérieur de la CLA, la méthode des images permet de garantir un flux nul à travers le sol et le sommet de la couche limite, et de représenter le phénomène de concentration du panache au voisinage d'une surface horizontale qui empêche la dispersion. En revanche, lorsque le rejet est effectué au-dessus de la CLA, les concentrations au sol sont considérées nulles.

Calcul de la concentration

Étant un modèle gaussien, le principe du modèle pX repose sur les hypothèses suivantes :

- Le rejet provient d'une source ponctuelle,
- Un rejet continu peut être discrétisé en une série de bouffées transportant une quantité donnée de polluants,
- Au sein de chaque bouffée, les variables météorologiques peuvent être considérées comme homogènes,
- La concentration de polluant est élevée dans le centre de la bouffée et décroît vers les bords selon une loi gaussienne, dans chacune des trois directions de l'espace.

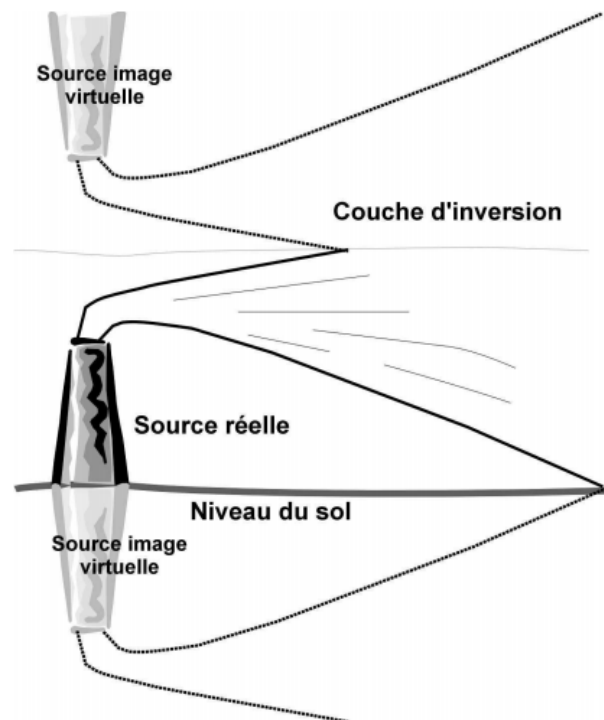


FIGURE 2.15 – Représentation schématique de la méthode des images implémentée dans le modèle pX, afin de prendre en compte la réflexion du panache sur le sol et la couche d'inversion. Source [Nicolas and Craffe \(2003\)](#).

On a vu dans le chapitre précédent que la concentration d'un polluant dans un point de l'espace, à un instant, peut être évaluée par la solution gaussienne de l'équation d'advection-diffusion (Équation 1.26). En revanche, dans le cas d'une situation réelle, où la variabilité des conditions météorologiques et les quantités rejetées au cours du temps sont significatives, cette solution n'est plus adaptée. Ainsi, la solution implémentée dans pX, dans le cas des champs proches et moyens, pour calculer la concentration en un point de coordonnées (x, y, z) à un instant t consiste à modifier l'équation 1.26, de façon à calculer la somme des contributions des N_b bouffées émises depuis le début du rejet. De plus, des termes sont ajoutés à la distribution verticale de la concentration, afin de prendre en compte les réflexions sur le sol ($F_{sol}(z)$) et le sommet de la CLA ($F_{hcl}(z)$) :

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{N_b} Q_i \times F_x(x_i) \times F_y(y_i) \times [F_z(z_i) + F_{sol}(z_i) + F_{hcl}(z_i)] \quad (2.2)$$

Avec Q_i la quantité de polluant transportée par la $i^{\text{ème}}$ bouffée. Les fonctions $F_x(x)$, $F_y(y)$, $F_z(z)$ ainsi que le terme de réflexion sur le sol $F_{sol}(z)$ pour une bouffée de coordonnées du centre de gravité (x_0, y_0, z_0) sont donnés par :

$$\begin{cases} F_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{\sigma_x^2}\right), \\ F_y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y-y_0)^2}{\sigma_y^2}\right), \\ F_z(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-z_0)^2}{\sigma_z^2}\right), \\ F_{sol}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z+z_0)^2}{\sigma_z^2}\right) \end{cases} \quad (2.3)$$

Alors que le terme de réflexions sur le sommet de la couche limite $F_{hcl}(z)$ fait intervenir une série de N réflexions :

$$F_{hcl}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \sum_{i=1}^N \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z+(2iHCL+z_0))^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z+(2iHCL-z_0))^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-(2iHCL+z_0))^2}{\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(z-(2iHCL-z_0))^2}{\sigma_z^2}\right) \quad (2.4)$$

Physiquement, plus le panache se développe sur la verticale, plus le nombre de réflexions est important. Ainsi, en fonction de la distance du panache de la source, trois cas de figure sont possibles :

- *Champ proche* : quand le panache est peu étendu sur la verticale (σ_z faible), assez loin du sommet de la couche limite et proche du sol, la réflexion sur la HCL est

négligeable et le panache est quasiment homogène sur la verticale : $N = 0$ dans l'équation 2.4.

- *Champ intermédiaire* : c'est le cas d'un panache assez développé sur la verticale ou le cas où l'on regarde les concentration près du sommet de la couche limite. Dans ces cas, quatre termes de réflexions sont considérés : $N = 1$ dans l'équation 2.4.
- *Champ lointain* : dans ce cas, le panache est considéré bien mélangé est homogène dans la couche limite. Ainsi, la composante verticale de la concentration ne dépend plus de la hauteur, ni de l'écart-type gaussien σ_z . L'équation 2.2 devient alors :

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{N_b} Q_i \times F_x(x_i) \times F_y(y_i) \times \frac{1}{HCL} \quad (2.5)$$

En pratique, le nombre de réflexions (critère de passage entre champ proche, intermédiaire et lointain) est choisi telle que l'erreur sur les concentrations soit toujours inférieure à 1% (Soulhac, 2002; Korsakissok et al., 2019).

Hauteur de couche limite instationnaire

Les conditions météorologiques étant variables, la hauteur de la couche limite peut être instationnaire, et donc la stabilité atmosphérique peut varier au cours du temps durant la journée (e.g, cycle diurne). Lors de passage d'une situation d'instabilité (le jour) à une situation de stabilité (la nuit), la hauteur de la couche limite diminue, ce qui provoque une augmentation de la concentration du panache à l'intérieur de la couche limite. On parle du phénomène de « reconcentration du panache », phénomène qui n'est pas physiquement réaliste. Pour y remédier dans le modèle pX, au lieu d'utiliser la HCL physique à un instant donné et à la position de la bouffée, on utilise une *hauteur de mélange* qui représente la hauteur de la couche résiduelle, et qui tient compte de la hauteur maximale à laquelle la bouffée a été mélangée.

En outre, comme la contribution des bouffées baisse avec leur distance au point de calcul, il est utile de définir un *seuil de coupure* qui est un critère de la distance au-delà de laquelle la contribution des bouffées est supposée négligeable. Ce seuil est un paramètre d'entrée que l'utilisateur peut fixer, et qui prend comme valeur par défaut 4. Physiquement, cela revient à négliger la contribution d'une bouffée au-delà d'une distance, par rapport au point de calcul, égale à 4 fois l'écart-type de diffusion de la bouffée.

2.4.3 Modèle d'advection

L'advection d'une bouffée désigne son déplacement horizontal. Dans pX, les bouffées se transportent à travers un champ de vent non stationnaire et hétérogène, et la position

du centre de gravité d'une bouffée à un instant donné est calculée à l'aide d'un schéma d'Euler. Ce schéma numérique simple, consiste à calculer la position du centre de la bouffée dans une direction x à l'instant $t + \Delta t$ à partir de sa position à l'instant t :

$$x(t + \Delta t) = x(t) + U(t)\Delta t \quad (2.6)$$

Avec $U(t)$ la vitesse moyenne du vent dans la direction x , à l'instant t . Comme les champs du vent en entrée de pX sont définis sur une grille 3D, et pour des dates qui ne correspondent pas nécessairement aux dates de calcul pX, la vitesse d'advection $U(t)$ est calculée à l'aide d'une interpolation, spatiale et temporelle, des données du vent dans la maille contenant le centre de la bouffée (Korsakissok et al., 2019).

La précision de ce schéma d'advection est naturellement liée à la finesse du pas de temps Δt , qui est un paramètre d'entrée choisi par l'utilisateur selon la complexité de l'écoulement. Dans ce manuscrit ce pas de temps est fixé à 10 secondes.

2.4.4 Modèle de diffusion

Nous avons vu dans le chapitre précédent que dans le cas d'un modèle gaussien, la diffusion des bouffées est traduite par leur croissance avec le temps, pour représenter le mélange du panache par la turbulence atmosphérique. Ce phénomène est représenté dans la solution approchée de pX (Équation 2.2) par les écarts-types σ_x , σ_y et σ_z qui augmentent avec le temps, dans les trois directions de l'espace (x, y, z) . Cette augmentation, qui modélise l'étalement du panache dans le temps est décrite par des lois empiriques des écarts-types gaussiens (c.f., Paragraphe 1.8.3). Dans le modèle pX, plusieurs lois sont implémentées : (i) loi de Doury, (ii) loi de Pasquill, loi de Briggs et (ii) la loi basée sur la théorie de la similitude de Monin-Obukhov. Dans ce manuscrit, les deux premières lois sont utilisées, grâce à leur simplicité d'implémentation liée à l'utilisation de champs météorologiques de base. De plus, de précédentes comparaisons modèles-mesures avec le modèle pX ont mis en évidence une performance comparable entre les écarts types de Pasquill et ceux de la similitude tels qu'implémentés dans pX, par exemple sur le cas de Fukushima. L'amélioration du préprocesseur météorologique AROME pour pX permettant d'utiliser les écarts types de la similitude et sa validation pourra faire partie des perspectives du présent travail.

2.4.5 Reconstruction du panache

Pour un modèle gaussien à bouffées, le temps de calcul augmente linéairement avec le nombre de bouffées créées. En outre, plus les bouffées augmentent en s'éloignant de la source, plus le recouvrement devient important entre les bouffées. Ceci dit qu'il est

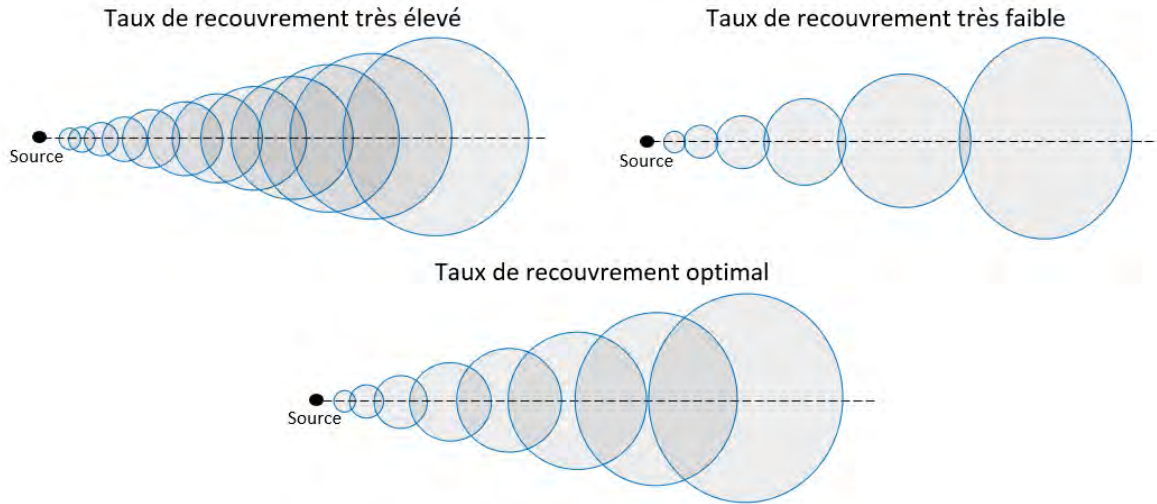


FIGURE 2.16 – Reconstruction du panache avec trois cas du taux de recouvrement : (i) très élevé, (ii) faible et (ii) optimal. On remarque que dans le premier et le troisième cas, on obtient le même résultat sur l’aspect continu du panache, mais avec un nombre moins important de bouffées dans le troisième cas.

possible de représenter le panache avec un nombre de bouffées moins important, avec un aspect continu, afin d’optimiser le temps de calcul. Par ailleurs, la discrétisation du panache en bouffées peut induire une sous-estimation de la concentration entre les bouffées, et une sur-estimation au centre des bouffées. Cette erreur dépend directement du taux de recouvrement des bouffées (noté α), qui est défini comme le rapport entre la taille caractéristique des bouffées (écart-type) sur la distance entre les bouffées :

$$\alpha(i, i + 1) = \frac{\sigma_i}{d(i, i + 1)} \quad (2.7)$$

Où σ_i est l’écart-type horizontal de la $i^{\text{ème}}$ bouffée, et $d(i, i + 1)$ est la distance entre les centres des bouffées (i) et ($i + 1$).

Ainsi, l’objectif de l’algorithme de reconstruction du panache implémenté dans pX est de restituer un panache présentant un nombre de bouffées plus faible, avec un taux de recouvrement constant (défini par l’utilisateur) le long du panache. Le choix de la valeur de α doit présenter un compromis entre le nombre de bouffées créées (lié au temps de calcul) et l’aspect continu du panache (Figure 2.16). Si α est très faible, les bouffées seront très espacées et le panache résultant aura un aspect ondulé (erreurs élevées), voire discontinu. Si α est très élevé le panache construit aura un aspect continu (erreurs faibles), mais avec un temps de calcul important. La valeur par défaut, du taux de recouvrement, prise dans pX est $\alpha = 0.65$, engendrant une erreur relative très faible ($< 0.01\%$).

Pour plus de détails sur la mise en oeuvre de l’algorithme de reconstruction du panache dans le modèle pX, le lecteur pourra se référer à [Soulhac and Didier \(2008\)](#).

2.5 Évaluation des ensembles météorologiques et construction des prévisions « sans couture »

2.5.1 Scores d'évaluation

En météorologie, la vérification et la validation des prévisions est une étape indispensable avant de les utiliser pour une application donnée. Pour ce faire, plusieurs scores statistiques, déterministes et probabilistes, existent dans la littérature. Dans ce paragraphe, nous présentons, de façon succincte, les scores utilisés dans ce manuscrit pour la validation météorologique des prévisions d'ensemble PEARO.

Biais

Le biais est un score déterministe, mais qui peut être calculé par rapport à la moyenne d'un ensemble pour identifier les erreurs systématiques de l'ensemble par rapport aux observations.

Pour une variable météorologiques X , le biais ($B(t)$) est calculé, pour chaque échéance de prévision t , par la relation suivante :

$$B(t) = \frac{1}{N_{day}} \sum_{d=1}^{N_{day}} (\langle X_{mod}^{(t,d)} \rangle - X_{obs}^{(t,d)}) \quad (2.8)$$

Avec N_{day} le nombre de jours dans la période d'intérêt. $\langle X_{mod}^{(t,d)} \rangle$ est la moyenne de l'ensemble à l'échéance t du jour d , et $X_{obs}^{(t,d)}$ est l'observation au même instant.

Diagramme de rang

Le diagramme de rang, appelé aussi diagramme de Talagrand, est un outils probabiliste qui permet d'évaluer la fiabilité d'une prévision d'ensemble, en comparant la distribution des observations vis-à-vis de celle estimée par l'ensemble, où les deux sont considérées comme des variables aléatoires indépendantes (Anderson, 1996; Talagrand, 1999; Hally et al., 2014).

Construction. Soit un ensemble de n prévisions de valeurs x_i ($i=1,2,\dots,n$), pour une observation y . On définit un *rang* r_j ($j=1,\dots,n+1$) par la position de chaque observation y parmi les x_i valeurs de prévisions de l'ensemble classées par ordre croissant. Alors un diagramme de rang est construit ainsi :

1. On classe les valeurs x_i de la plus petite à la plus grande : $x_1 < x_2 < \dots < x_n$.

2. On retient le rang r_j de l'observation par rapport aux valeurs x_i triées. Par exemple, le rang r_1 correspond à $y \leq x_1$, alors que le $k^{ième}$ rang r_k correspond à $x_{k-1} < y \leq x_k$.
3. On répète l'opération précédente pour toutes les observations, et on compte la fréquence φ_j de chaque rang r_j . Par exemple, la fréquence φ_1 du rang r_1 est égale au nombre d'observations telles que $y \leq x_i, \forall i \in [1, 2, \dots, n]$ divisé par le nombre total d'observations.
4. Finalement, le diagramme de rang est défini par $\varphi_j = f(r_j)$.

Interprétation. La forme d'un diagramme de rang permet d'évaluer la cohérence entre la distribution fournie par l'ensemble et celle liée aux observations. Ainsi, on distingue cinq formes standards des histogrammes de rang (2.17) :

- Un diagramme plat (ou uniforme), qui correspond à un ensemble fiable. Dans ce cas, l'observation correspondant à chaque prévision a autant de probabilité de se situer dans un des rangs (membres équiprobables).
- Un diagramme en forme de « U ». Dans ce cas, les observations sont à la fois trop souvent inférieures à x_1 et supérieures à x_n . L'ensemble est donc sous-dispersé, et l'incertitude des prévisions est sous-estimée.
- Un diagramme en forme de cloche « \cap ». Un tel diagramme correspond à un ensemble sur-dispersé, et l'incertitude est donc sur-estimée.
- Un diagramme asymétrique indique un biais systématique dans l'ensemble. Ce biais peut être positif (respectivement négatif), c'est-à-dire que le modèle souvent sur-estime (respectivement sous-estime) la variable observée.

Ratio Spread-skill

Comme démontré dans les travaux de Fortin et al. (2014), la capacité d'un ensemble à représenter les erreurs de simulations peut être évaluée par comparaison de l'erreur moyenne quadratique RMSE¹⁰ (appelée aussi *skill* en anglais) de la moyenne de l'ensemble à la dispersion de l'ensemble (*Spd*, pour *Spread* en anglais), celle-ci calculée aussi par rapport à la moyenne (Raynaud et al., 2012; Charrois et al., 2016). Pour une variable X , les termes *Spd* et *RMSE* sont définis, pour chaque échéance t , par :

$$Spd(t) = \sqrt{\frac{1}{N_{day}} \sum_{d=1}^{N_{day}} \frac{1}{N_{ens} - 1} \sum_{n=1}^{N_{ens}} \left(X_{mod,n}^{(t,d)} - \langle X_{mod}^{(t,d)} \rangle \right)^2} \quad (2.9)$$

10. Root Mean Squared Error

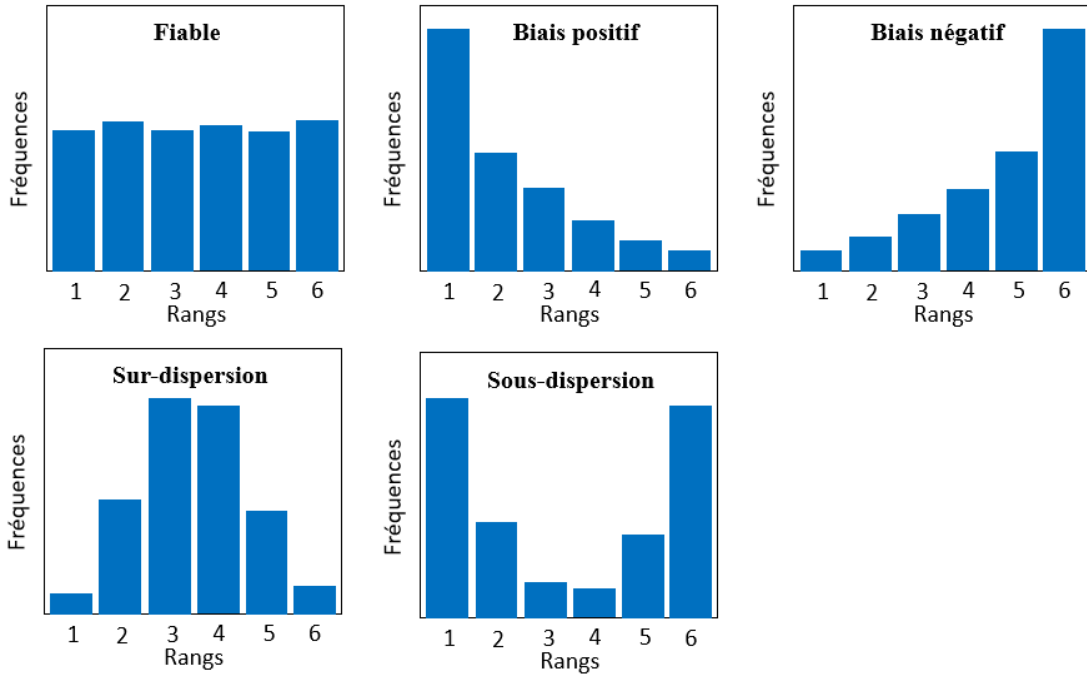


FIGURE 2.17 – Les différentes formes d’un diagramme de rang, avec l’interprétation de chacune, pour un exemple d’un ensemble composé de 5 membres.

$$RMSE(t) = \sqrt{\frac{1}{N_{day}} \sum_{d=1}^{N_{day}} (\langle X_{mod}^{(t,d)} \rangle - X_{obs}^{(t,d)})^2} \quad (2.10)$$

Où N_{ens} est la taille de l’ensemble ($N_{ens}=16$ dans le cas de la PEARO), et $X_{mod,n}^{(t,d)}$ représente la valeur de X du membre n de l’ensemble à l’échéance t .

Ce diagnostic peut être résumé en calculant le ratio spread-skill, qui doit être aussi proche de 1 que possible pour que l’ensemble soit fiable (Whitaker and Loughe, 1998). Les valeurs inférieures à 1 (respectivement supérieures à 1) indiquent que l’ensemble est sous-dispersif (respectivement sur-dispersif).

Continuous Ranked Probability Score (CRPS)

Le dernier score utilisé dans ce manuscrit pour évaluer la qualité des ensemble PEARO est le CRPS (Matheson and Winkler, 1976; Hersbach, 2000). C’est un score probabiliste fréquemment utilisé en météorologie pour vérification de la qualité globale des prévisions probabilistes d’une variable continue. Le CRPS est basé sur l’intégration de la distance entre la prévision et l’observation, où les deux sont représentées par des fonctions de répartition.

Si x est une variable continue, y la valeur observée de x et $\mathcal{C}^f(x)$ et $\mathcal{C}^o(x)$ les fonctions de répartition de la prévision et de l’observation, respectivement, alors le CRPS de l’ensemble,

pour une échéance t , est calculé par :

$$CRPS(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{t=0}^{N_t} \int_{-\infty}^{+\infty} (\mathcal{C}^f(x) - \mathcal{C}^o(x))^2 dx \quad (2.11)$$

Avec N_t le nombre total d'échéances, et la fonction $\mathcal{C}^o(x)$ est donnée par :

$$\mathcal{C}^o(x) = H(x - y) \quad (2.12)$$

Où H est la fonction de Heaviside définie par :

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

Le score parfait est atteint lorsque le CRPS est égal à 0.

2.5.2 Significativité des scores : test statistique de Wilcoxon

Définition et objectif

Lorsque l'on s'intéresse à la comparaison de deux ensembles, l'observation visuelle des différences des scores n'est pas suffisante. Il est nécessaire de déterminer si les différences observées sont statistiquement significatives ou non. C'est le rôle du test de significativité de Wilcoxon (Wilcoxon et al., 1963). Il s'agit d'un test statistique non-paramétrique¹¹ qui a pour objectif de vérifier si deux échantillons proviennent de la même distribution ou non.

Hypothèses du test

Les hypothèses du test de Wilcoxon sont :

- Hypothèse nulle \mathcal{H}_0 : les distributions des deux échantillons sont identiques (la différence entre les deux échantillons n'est pas significative).
- Hypothèse alternative \mathcal{H}_1 : les distributions des deux échantillons diffèrent (la différence entre les deux échantillons est significative).

Calcul de la statistique W

Soit $\omega_i^{(1)}$ et $\omega_i^{(2)}$ deux échantillons dépendants, et n la taille de la série des paires $(\omega_i^{(1)} - \omega_i^{(2)})$ après avoir exclu les paires telles que $|\omega_i^{(1)} - \omega_i^{(2)}| = 0$.

Dans un premier temps, la série $|\omega_i^{(1)} - \omega_i^{(2)}|$ est utilisée pour déterminer les rangs des paires des différences des deux échantillons $(\omega_i^{(1)} - \omega_i^{(2)})$. Ensuite, on calcule la somme des

11. C'est à dire qu'il nécessite pas d'hypothèse sur la loi de distribution des données.

rangs des différences positive (W^+) et celle des différences négatives (W^-). La statistique de Wilcoxon (W) est alors calculée à partir de la petite valeur de W^+ et W^- :

$$W = \min(W^+, W^-) \quad (2.14)$$

Sous l'hypothèse \mathcal{H}_0 que l'on teste, et pour un échantillon suffisamment grand (typiquement $n \geq 25$), on a $W^+ = W^-$, et la statistique W converge vers une loi normale de moyenne $\mu_W = 0$ et de variance $\sigma_W^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{24}$.

Interprétation

Après le calcul de la statistique W , la valeur-p (p_{valeur}) est calculée. Cette dernière correspond à la probabilité qui mesure le degré de certitude avec lequel il est possible de rejeter l'hypothèse \mathcal{H}_0 : plus la p_{valeur} est faible, plus la preuve de rejeter l'hypothèse \mathcal{H}_0 est solide.

Pour interpréter le résultat du test de Wilcoxon, on définit un seuil de risque (α), qui dépend fortement du cas d'application. Ainsi, si $p_{valeur} < \alpha$, l'hypothèse nulle est rejetée, et par conséquent la différence entre les deux échantillons $\omega_i^{(1)}$ et $\omega_i^{(2)}$ est considérée comme statistiquement significative.

Méthode numérique

Pour implémenter le test de Wilcoxon dans le cadre de ces travaux de thèse, on utilise la fonction **wilcoxon** de la librairie *scipy* du langage Python. Les vecteurs des différences des scores, dans les échéances de prévision, sont utilisées directement en entrée de cette fonction.

2.5.3 Construction des ensembles météorologiques sans couture

Problématique et objectif

Dans le cadre de la modélisation d'ensemble de la dispersion accidentelle, les ensembles météorologiques sont souvent utilisés sous forme de séries temporelles s'étendant sur des périodes relativement longues (de l'ordre d'un mois dans notre cas d'étude). Or, généralement les réseaux de ces prévisions couvrent des périodes qui dépassent les 24 h du jour (~ 48 h dans le cas de la PEARO), il est ainsi impératif de former des séries temporelles continues en effectuant des séries de *jointures* (ou *raccordements*) des différents ensembles de manière à couvrir une longue période de façon continue. Étant donné que les membres de deux prévisions successives sont indépendants les uns aux autres (par exemple, le membre 1 d'une prévision est aussi indépendant du membre 1 du lendemain que tout

autre membre), la jointure membre(i)–membre(i) est aléatoire. Cela peut provoquer des sauts non-physiques traduits par des discontinuités aux moments des raccordements des ensembles. Ainsi, l’objectif consiste à résoudre un problème classique d’affectation, où chaque membre d’un ensemble antérieur doit être affecté au bon membre de l’ensemble postérieur, ce qui permettra de construire des ensembles « *sans couture* » (appelés aussi ensembles *cohérents*) où les discontinuités seront optimisées. On note que cette méthode ne sera utilisée qu’au Chapitre 4.

Critères de cohérence et algorithme retenu

Dans la littérature il existe plusieurs méthodes d’affectation (Aleksovska, 2020) plus ou moins complexes. Toutefois, dans notre cas d’étude on a tout intérêt à retenir une méthode permettant de satisfaire les deux critères de cohérence suivant :

- Critère d’unicité : désigne le fait que chaque membre de l’ensemble antérieur doit être affecté à un seul et unique membre de l’ensemble postérieur.
- Critère de continuité : désigne le fait que les discontinuités doivent être optimisées de façon à ce que la transition entre deux membres soit minimale.

Ainsi, dans ce manuscrit l’algorithme de Kuhn-Munkres Kuhn (1955) est retenu (appelé dans la suite Munkres). Outre le fait qu’il satisfasse au critère d’unicité, le choix de cet algorithme, appelé aussi méthode hongroise, est motivé par les résultats des travaux de Aleksovska et al. (2021) qui ont montré que cette méthode permet d’obtenir des ensembles météorologiques plus cohérents par rapport à d’autres méthodes.

Développement mathématique

L’algorithme de Munkres peut être exprimé de plusieurs façons. L’une des expressions possibles est par l’utilisation de l’optimisation linéaire.

On considère deux ensembles météorologiques \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , de même taille N , sous forme d’un graphe biparti¹², où \mathcal{E}_1 est situé à gauche (ensemble antérieur) et \mathcal{E}_2 à droite (ensemble postérieur) (Figure 2.18). On note $d_{i,j}$ la distance entre les membres $i \in \mathcal{E}_1$ et $j \in \mathcal{E}_2$. L’algorithme vise à trouver un couplage avec unicité des membres de distance minimale, c’est à dire à chercher la correspondance bijective optimale entre \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 en minimisant la distance totale d’affectation. Ainsi, le membre $\tilde{j} \in \mathcal{E}_2$ couplé au membre $i \in \mathcal{E}_1$ est donné par :

$$\tilde{j}_i = \arg \min_{j \in \mathcal{E}_2} \left(\sum_{i \in \mathcal{E}_1} d_{i,j} \right) \quad , \quad j \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (2.15)$$

12. En mathématiques, un graphe est dit biparti si on peut partager son ensemble de sommets en deux groupes \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 tels qu’il n’y ait aucune arête entre éléments de \mathcal{E}_1 et aucune arête entre éléments de \mathcal{E}_2 .

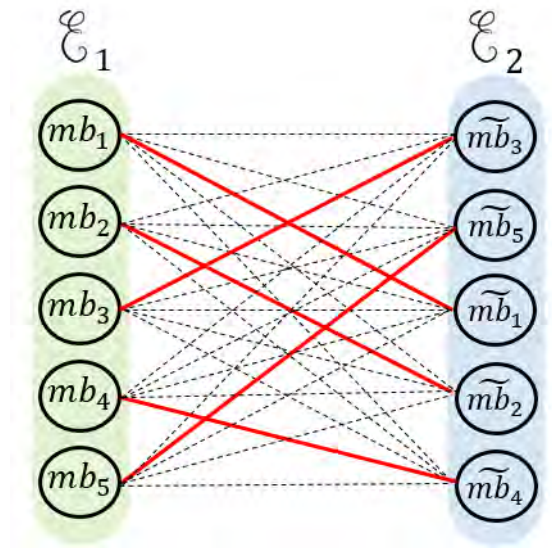


FIGURE 2.18 – Exemple d’un problème d’affectation sous forme de graphe biparti. L’objectif de l’algorithme de Munkres est de trouver une bijection entre les membres des deux ensembles \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , avec une distance totale d’affectation (somme des arêtes rouges dans cet exemple) minimale.

Méthode numérique

Pour implémenter l’algorithme de Munkres, on utilise dans ces travaux de thèse la fonction **Munkres** de la librairie *munkres* du langage Python. On utilise en entrée de cette fonction une matrice de distance (\mathcal{D}) entre les membres de l’ensemble antérieur (en lignes) et l’ensemble postérieur (en colonnes) :

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} d_{1,1} & d_{1,2} & \cdots & d_{1,c} & \cdots & d_{1,N} \\ d_{2,1} & d_{2,2} & \cdots & d_{2,c} & \cdots & d_{2,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{l,1} & d_{l,2} & \cdots & d_{l,c} & \cdots & d_{l,N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{N,1} & d_{N,2} & \cdots & d_{N,c} & \cdots & d_{N,N} \end{pmatrix}$$

Où $d_{l,c}$ désigne la distance entre le $l^{\text{ème}}$ membre de l’ensemble antérieur et le $c^{\text{ème}}$ membre de l’ensemble postérieur. Dans le cas de la PEARO, \mathcal{D} est une matrice 16×16 ($N = 16$). L’intervalle des échéances, les variables météorologiques et la distance utilisée pour calculer la matrice \mathcal{D} sont tous documentés dans le Paragraphe 4.3.2 du Chapitre 4.

2.6 Réduction des ensembles météorologiques par « clustering »

2.6.1 Contexte et objectif du clustering

Dans le chapitre précédent, nous avons abordé la nécessité de la prévision d'ensemble pour représenter les incertitudes météorologiques. Toutefois, l'application opérationnelle des systèmes d'ensemble peut être rendue difficile, dans certains cas, en raison de leur coût de calcul beaucoup plus élevé que celui de l'approche déterministe. De plus, ce coût de calcul devient encore plus important lorsqu'on utilise des systèmes d'ensemble à fine échelle. Parmi les situations opérationnelles sensibles au temps de calcul, on trouve les cas d'urgences nucléaires où les ensembles météorologiques sont utilisés, en amont, au début d'une chaîne de prévision de la dispersion des radionucléides dans l'atmosphère, afin de produire, en aval, un outil de prise de décision. Ainsi, pour tirer le meilleur parti des ensembles météorologiques tout en diminuant le coût de calcul, une solution possible est la diminution du nombre de membres utilisés en gardant certaines propriétés statistiques de l'ensemble complet. Pour ce faire on utilise des méthodes de classification non-supervisée (appelée aussi « *clustering* »).

Le clustering regroupe l'ensemble de techniques mathématiques visant à partitionner un groupe d'individus en classes (ou « *clusters* ») homogènes. Autrement dit, on part d'un jeu de données Γ composé de plusieurs individus non-étiquetés (dans notre cas les membres PEARO), et on cherche les typologies *a priori* non-connues de chacun des individus en classes, tels que les individus d'une même classe soient le plus semblables possibles et que les classes soient le plus distinctes possibles. On parle d'apprentissage non-supervisé des données (en anglais *unsupervised learning*).

2.6.2 Ingrédients du clustering

Ce paragraphe a pour but de définir théoriquement les éléments nécessaires au fonctionnement du clustering. Les notations définies seront ainsi valables pour la suite de ce chapitre.

Notion de similarité

Afin de regrouper les individus qui se ressemblent et séparer ceux qui diffèrent, on définit une métrique de *similarité* qui permet de mesurer le degré de ressemblance entre individus. Mathématiquement, la similarité est représentée par une distance. Ainsi, les individus qui se ressemblent (respectivement qui diffèrent) sont séparés d'une distance faible (respectivement grande). L'une des distances les plus utilisées est la *distance euclidienne*.

Pour des raisons de simplicité, on considère que les individus sont définis sur un espace 3D de composantes (x, y, z) . Ainsi, le jeu de données initial Γ est composé de n individus, où chacun de ces individus est représenté par un point $M_i(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, \dots, n$. Ainsi, la distance euclidienne entre deux individus M_i et M_j est par définition :

$$d(M_i, M_j) = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \quad (2.16)$$

Inertie totale, inertie intra-cluster et inertie inter-cluster

Premièrement, on considère un nuage de points $\Gamma = \{M_i, i = 1, 2, \dots, n\}$, de *centre d'inertie* (appelé aussi centre de gravité ou barycentre) $G(\bar{x}_i, \bar{y}_i, \bar{z}_i)$, où $\bar{\nu}_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \nu_i, \nu = \{x, y, z\}$. On appelle *inertie totale* de Γ la moyenne des carrés des distances de ses points M_i au centre d'inertie G . C'est une mesure de la dispersion des points autour du barycentre :

$$\mathcal{I}(\Gamma) = \frac{1}{n} \sum_{M_i \in \Gamma} d^2(M_i, G) \quad (2.17)$$

Ensuite, on considère un clustering $\mathcal{C} = \bigcup_{k=1}^K \mathcal{C}_k$ du nuage de points Γ . Notons n_k l'effectif du $k^{\text{ème}}$ cluster \mathcal{C}_k de barycentre G_k et d'inertie $\mathcal{I}(k) = \frac{1}{n_k} \sum_{M_k \in \mathcal{C}_k} d^2(M_k, G_k)$. Les clusters \mathcal{C}_k sont d'autant plus homogènes que les inerties $\mathcal{I}(k)$ de chaque classe sont faibles. La somme de ces inerties définit l'*inertie intra-cluster* (ou intra-classe), qui mesure la dispersion des points à l'intérieur de chaque cluster :

$$\mathcal{I}_{intra} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K \sum_{M_k \in \mathcal{C}_k} d^2(M_k, G_k) \quad (2.18)$$

Enfin, il est facile de démontrer que l'inertie totale d'un nuage de point est différente de la somme des inerties des clusters qui le composent (i.e., inertie intra-cluster), sauf dans le cas particulier où les barycentres de tous les clusters sont confondus. Cela est dû au fait qu'il faut aussi prendre en compte la dispersion des clusters autour du barycentre global. On parle de l'*inertie inter-cluster* (ou inter-classe) :

$$\mathcal{I}_{inter} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^K n_k d^2(M_k, G_k) \quad (2.19)$$

L'inertie intra-cluster et l'inertie inter-cluster définissent, respectivement, les critères d'homogénéité et de séparation d'un clustering. Ainsi, le principe d'un clustering est de minimiser l'inertie intra-cluster et maximiser l'inertie inter-cluster (Figure 2.19). De plus, on montre que la somme de ces deux inerties est égale à l'inertie totale. Ce résultat est connu sous le nom de la *décomposition de Huygens* :

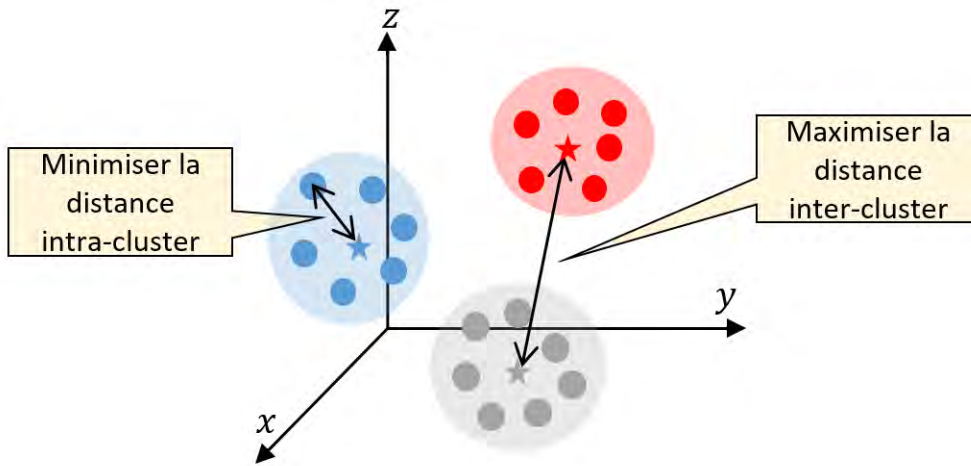


FIGURE 2.19 – Exemple d’un clustering d’un nuage de points en 3 clusters. Les centres d’inertie de chaque cluster sont représentés par des étoiles. Le principe du clustering est de maximiser la distance inter-cluster et minimiser la distance intra-cluster.

$$\mathcal{I}(\Gamma) = \mathcal{I}(\mathcal{C}_1 \cup \mathcal{C}_2 \cup \dots \cup \mathcal{C}_K) = \mathcal{I}_{intra} + \mathcal{I}_{inter} \quad (2.20)$$

2.6.3 Algorithmes de clustering

Avant de décrire les méthodes de clustering, on note que dans un cadre non-supervisé, une étape de prétraitement des données est toujours intéressante avant l’application d’une méthode de clustering (Celebi et al., 2013; Lemaire et al., 2015). Bien souvent, une mauvaise mise en forme du jeu de données de départ produit un clustering complexe et difficile à exploiter. De ce fait, la phase de prétraitement permet une représentation plus performante des données dans le contexte de l’étude. En outre, étant donné que le choix d’une méthode dépend généralement de la nature des variables dans le jeu de données de départ, la phase de prétraitement peut aussi aider au choix de la méthode appropriée pour une application donnée.

Dans la suite de ce paragraphe, nous présentons seulement les méthodes de clustering utilisées dans le présent manuscrit pour classifier les membres PEARO. Cependant, il semble intéressant d’indiquer que le clustering est un processus qui ne peut pas être objectivé. Cette constatation a fait l’objet des travaux de Von Luxburg et al. (2012) et Hennig (2015a,b), qui montrent que dans le cas général, il n’existe pas une méthode de clustering meilleure qu’une autre.

Le choix des méthodes utilisées ici est motivé par trois raisons : premièrement, (i) ce sont des méthodes classiquement utilisées dans la littérature pour classifier les champs atmosphériques pour différentes applications (e.g Clare et al., 2023). Ensuite, (ii) leur

simplicité d'implémentation numérique les rendent très pratiques pour des cas d'études où l'on utilise des données complexes. Enfin, (iii) ce sont des méthodes qui permettent à l'utilisateur de contrôler le nombre de classes désiré.

Clustering hiérarchique ascendant (CHA)

Pour classifier un nuage de point Γ composé de n individus, le principe du clustering hiérarchique ascendant (CHA) est de considérer initialement cette population comme la réunion de n classes, chacune contenant un seul individu, et de regrouper progressivement les classes deux-à-deux par agrégation, selon leur similarité. L'algorithme CHA (Johnson, 1967) commence par le calcul d'une matrice ($n \times n$) des distances des individus deux-à-deux. Ensuite, les deux points les plus proches sont regroupés dans une seule classe représentée par la suite par son barycentre. À ce niveau, il y donc $n - 1$ classes. Une matrice des distances est de nouveau calculée entre les individus et la première classe construite, et les deux objets (individus ou classes) les plus proches sont regroupés. Ce processus se poursuit en remplaçant individus par classes, si nécessaire, et en représentant chaque classe par son barycentre. Après $n - 1$ itérations, une classe unique regroupant tous les individus est obtenue. Les distances qui séparent les classes peuvent être déterminées de différentes manières. On parle du critère d'intégration.

Selon le critère d'intégration, on distingue plusieurs approches du CHA. Les deux approches utilisées dans le présent manuscrit sont :

- L'approche *Complete-linkage* : la distance entre deux classes \mathcal{C}_k et \mathcal{C}_l est la distance entre leurs 2 points les plus éloignés :

$$d_{max}(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_l) = \max_{M_k \in \mathcal{C}_k, M_l \in \mathcal{C}_l} \{d(M_k, M_l)\} \quad (2.21)$$

- L'approche de *Ward* : la distance entre deux classes \mathcal{C}_k et \mathcal{C}_l est la distance de Ward, définie par :

$$d_W(\mathcal{C}_k, \mathcal{C}_l) = \left(\frac{n_k \times n_l}{n_k + n_l} \right) d^2(G_k, G_l) \quad (2.22)$$

Au final, le résultat du CHA est présenté graphiquement sous forme d'un arbre hiérarchique binaire, appelé *dendrogramme* (Figure 2.20 à droite), qui représente les agrégations successives jusqu'au regroupement de tous les individus dans un cluster unique. La hauteur d'une branche est proportionnelle à la distance entre les deux objets regroupés, soit la distance intra-cluster. La classification est ainsi définie à partir du dendrogramme par une coupure horizontale de l'arbre à un niveau fixé. Il existe plusieurs méthodes pour estimer le niveau optimal de coupure et donc le nombre de clusters. Parmi ces méthodes on trouve *la méthode du coude* (Dong et al., 2016) utilisée dans ces travaux, et qui consiste à représenter l'inertie intra-cluster en fonction du nombre de classes (Figure 2.20 à droite). Le

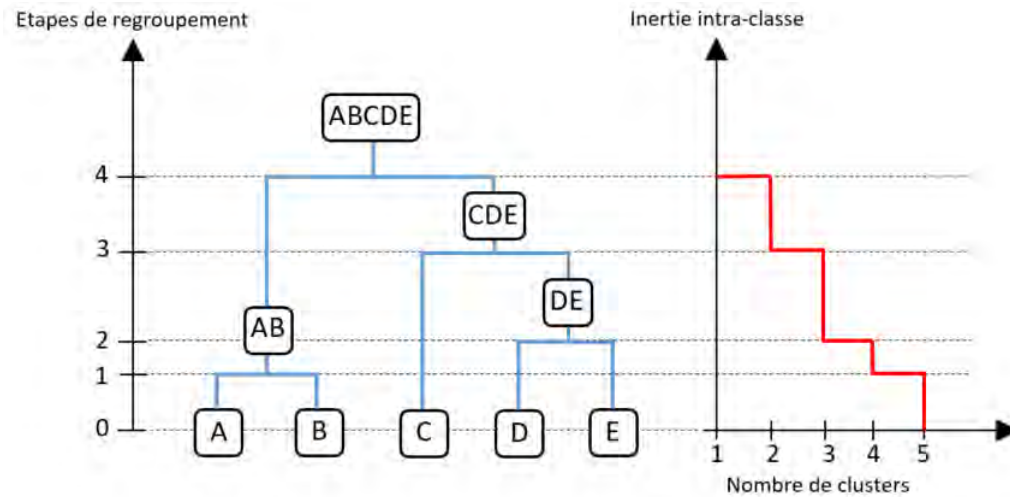


FIGURE 2.20 – À gauche : exemple d'un dendrogramme du CHA, avec les étapes de regroupements des classes. À droite : courbe d'inertie intra-classe en fonction du nombre de classes, utilisée dans la méthode du coude pour estimer le nombre de classes optimal. Dans cet exemple un nombre de classes $K = 3$ peut être un bon choix.

nombre de clusters optimal est celui associé à un saut important de l'inertie intra-classe. Cette méthode est détaillée dans le Paragraphe 5.2.5 du Chapitre 5.

Clustering par partition

Au contraire des algorithmes de CHA qui procède par agrégation progressive des classes, les méthodes de clustering par partitionnement se basent sur le partitionnement de l'espace des données en minimisant une fonction coût. Dans cette partie on décrit particulièrement l'un des principaux algorithmes de cette famille nommé *K-means* (Forgy, 1965; Lloyd, 1982).

Initialisation de l'algorithme. L'initialisation de l'algorithme de K-means nécessite la détermination a priori du nombre de classes (K). L'initialisation est faite ainsi par positionnement de K individus, appelés *centroïdes* initiaux. Ce positionnement peut être fait de plusieurs façons. Par ailleurs, on présente seulement la méthode d'initialisation des centroïdes appelée *K-Means++* (Arthur and Vassilvitskii, 2007). Cette méthode consiste à choisir aléatoirement un individu M_1 parmi les individus du jeu de données Γ , et de le considérer comme premier centroïde. Ensuite, une probabilité est associée à chacun des autres individus M_i . Cette probabilité est proportionnelle à $d(M_1, M_i)$: la chance d'un individu à représenter le deuxième centroïde est d'autant plus forte que sa distance du premier centroïde est grande. Ce processus est répété en calculant les distances au centroïde le plus proche, jusqu'au positionnement des K centroïdes initiaux.

Traitement de l’algorithme. Une fois que les K centroïdes sont initialisés, l’algorithme répète deux opérations jusqu’à ce qu’il ait atteint sa convergence :

1. Chaque point M_i est assigné au cluster le plus proche. Ainsi K classes sont créés.
2. Positionnement des K nouveaux centroïdes, valant le barycentre de chacune des K classes construites précédemment (i.e., la position moyenne des individus de chaque classe).

Convergence de l’algorithme. Les deux opérations précédentes sont réitérées jusqu’à ce que l’inertie intra-classe de la population Γ atteigne un minimum local. A ce moment, un nouveau positionnement des centroïdes n’induit plus de changement de classe pour aucun individu, et la classification est ainsi stable. Lorsque le jeu de données est très grand, un nombre maximum d’itérations peut être défini préalablement afin d’optimiser le coût de calcul.

La Figure 2.21 reprend les étapes de l’algorithme K-means dans le cas simple d’un jeu de données composé de 10 individus, partitionné en 2 clusters. On note que, à cause des états initiaux aléatoires, la classification donné par l’algorithme K-means n’est pas reproductible, et donc besoin de l’exécuter plusieurs fois pour obtenir des résultats robustes.

Méthode numérique

Pour implémenter les trois algorithmes de clustering présentés ci-dessus, on utilise le module **Clustering** de la librairie *Scikit-Learn* (Pedregosa et al., 2011) du langage Python. Ce module dispose des fonctions de plusieurs algorithmes de clustering, y compris les deux approches Complete-linkage et Ward du CHA ainsi que l’algorithme K-means.

2.7 Synthèse

Le site expérimental de La Hague présente plusieurs avantages pour l’étude de la dispersion atmosphérique en champs proches et moyens. Dans cette zone, se situe l’usine de retraitement du combustible usé Orano La Hague, premier émetteur industriel de l’isotope du ^{85}Kr , qui peut être utilisé comme traceur de la dispersion à courtes et moyennes distances grâce à son inertie physico-chimique. Afin d’étudier le transfert radioactif de ses effluents gazeux dans l’environnement, l’usine Orano effectue en permanence des mesures des quantités rejetées du ^{85}Kr ; le terme source de ^{85}Kr est connu. De plus, le site de La Hague connaît régulièrement des campagnes de mesures expérimentales de la concentration du ^{85}Kr autour de l’usine, et bénéficie d’une densité importante de stations d’observations météorologiques (stations Météo-France et IRSN). Ces sources d’observations sont

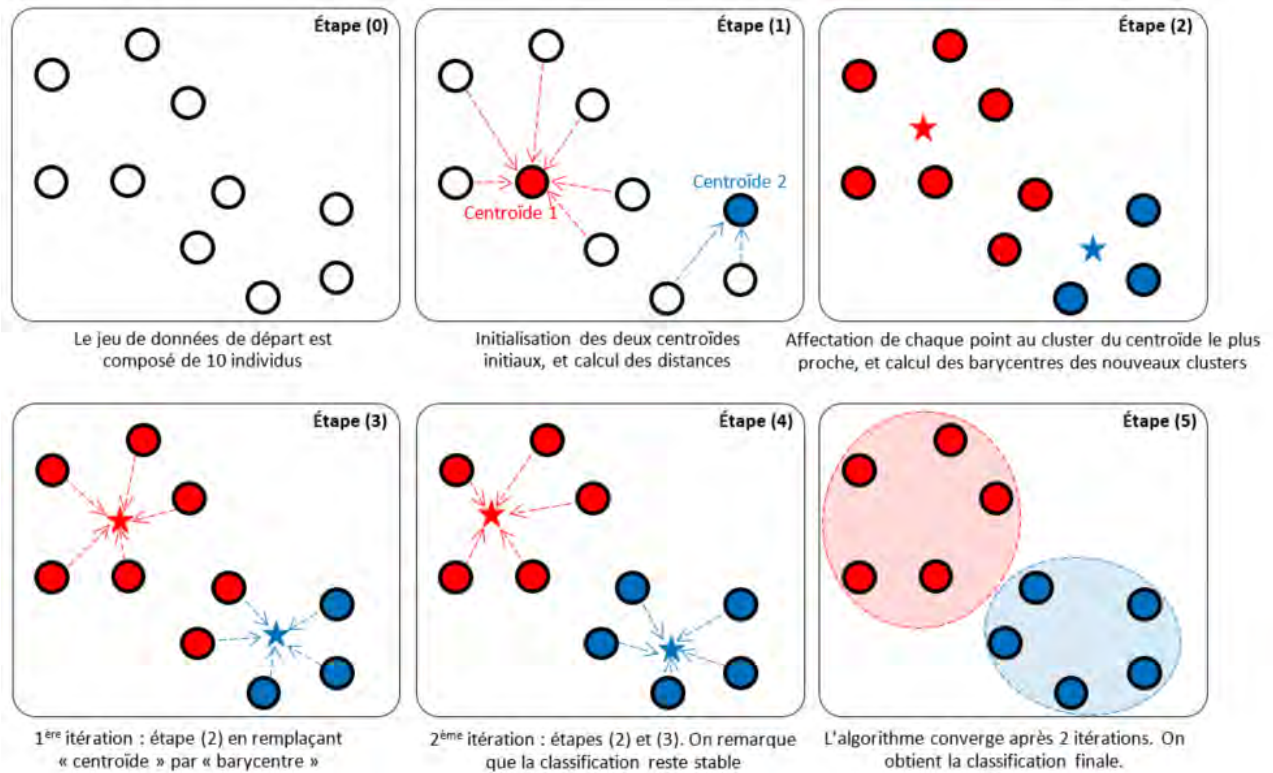


FIGURE 2.21 – Les étapes de l’algorithme K-means. Un jeu de données simple, composé de 10 individus, est partitionné en 2 clusters. Les individus sont représentés par des cercles, et les barycentres des clusters par des étoiles. Les flèches en pointillées indiquent la distance de chaque individu au barycentre le plus proche, i.e. au cluster auquel l’individu est assigné. Les couleurs bleue et rouge distinguent les deux clusters

combinées et utilisées dans le cadre de ces travaux de thèse afin d'étudier la propagation des incertitudes météorologiques dans les simulations de la dispersion atmosphérique, sur une période totale de 30 jours entre décembre 2020 et janvier 2021.

Pour calculer des prévisions de la dispersion atmosphérique, le modèle gaussien à bouffées pX de l'IRSN est utilisé. Pour caractériser les incertitudes météorologiques en entrée de pX nous utilisons la prévision d'ensemble AROME (PEARO) de Météo-France, qui fournit des prévisions probabilistes horaires à fine-échelle. Cependant, avant de les utiliser en entrée du modèle pX, les ensembles PEARO doivent être validés dans la zone d'étude. Pour ce faire, nous réalisons des comparaisons modèle-observation à l'aide de quatre scores : biais, diagramme de rang, ratio spread-skill et CRPS. Ces scores sont calculés dans la zone d'étude sur une période de trois mois couvrant la période de calcul de la dispersion atmosphérique : du 01/12/2020 jusqu'au 28/02/2021. Par ailleurs, pour s'approcher d'une situation d'accident nucléaire, la PEARO est utilisée pour le calcul de la dispersion sous forme d'une série temporelle continue dans le temps. Ainsi, plusieurs ensembles, issus de plusieurs réseaux, doivent être raccordés, ce qui peut induire des sauts non-physiques. Pour y remédier, on utilise l'algorithme d'affectation de Munkres, permettant un raccordement bijectif et optimal des membres des ensembles, et ainsi de construire des ensembles sans-couture (ou cohérents), où les discontinuités liées aux changements de réseaux sont optimisées.

Le dernier aspect important documenté dans ce chapitre est la réduction de la taille des ensembles météorologiques. En effet, pour des raisons d'optimisation du coût de calcul dans les cas d'accidents nucléaires, il est nécessaire d'utiliser des sous-ensembles météorologiques plutôt que l'ensemble complet. Ces sous-ensembles sont naturellement censés être représentatifs d'une grande partie de l'incertitude exprimée par l'ensemble complet. Pour ce faire, nous utilisons des algorithmes de clustering pour classifier les membres météorologiques en groupes les plus distincts possibles. Trois algorithmes sont retenus dans le présent manuscrit : (i) Complete-linkage et (ii) Ward, qui sont de la famille du clustering hiérarchique ascendant, basé sur une agrégation progressive des membres selon la distance qui les sépare, et (iii) l'algorithme K-means qui est de la famille du clustering par partition, basé sur le partitionnement de l'espace des variables.

Mise en place et évaluation d'un système de prévision probabiliste de la dispersion des polluants à courte distance

Sommaire

3.1	Résumé de l'article	104
3.2	Article : Combining short range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles : probabilistic indicators and evaluation during a ^{85}Kr field campaign	106

Ce chapitre reprend les travaux présentés dans l'article [El-Ouartassy et al. \(2022\)](#) publié en 2022 dans le journal Atmospheric Chemistry and Physics « *Combining short-range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles : probabilistic indicators and evaluation during a ^{85}Kr field campaign* »

3.1 Résumé de l'article

L'amélioration des systèmes d'alertes et de prise de décision lors d'un accident est une question qui préoccupe les scientifiques depuis les débuts de la filière nucléaire de production d'énergie. Dès lors, afin d'assurer la sûreté nucléaire des territoires en cas de rejet radioactif accidentel, les modèles de dispersion atmosphérique sont devenus des outils indispensables pour prévoir le transport dans l'atmosphère et le dépôt sur le sol de matières radioactives. Plusieurs études ont toutefois montré que les simulations des modèles de dispersion contiennent une part d'incertitude qui peut rendre leur utilisation en conditions opérationnelles délicates (Rao, 2005; Korsakissok et al., 2020). Les prévisions météorologiques, qui constituent une donnée d'entrée essentielle pour ces modèles, sont l'une des principales sources d'incertitudes.

Depuis fin des années 1990, plusieurs travaux ont étudié la propagation des incertitudes inhérentes à la météorologie dans les simulations de la dispersion atmosphérique en adoptant une approche de modélisation probabiliste basée sur l'utilisation de prévisions d'ensemble météorologiques en entrée des modèles de dispersion au lieu d'une seule prévision déterministe (Straume et al., 1998; Leadbetter et al., 2022). Il apparaît cependant que, jusqu'à présent, aucune étude n'a visé à utiliser une telle approche pour modéliser la dispersion atmosphérique à l'échelle locale (moins de 20 km de la source). De plus, la plupart des travaux menés se sont basés sur des prévisions météorologiques d'ensemble à résolution spatiale assez lâche (plusieurs dizaines de kilomètres) (Le et al., 2021; De Meuter and Delcloo, 2022).

Le but de cette étude est d'évaluer l'intérêt d'une approche probabiliste pour prévoir des dépassements de seuil d'activité volumique d'un radionucléide rejeté dans l'atmosphère dans un contexte accidentel, et de démontrer la valeur ajoutée des ensembles météorologiques à haute résolution, spatiale et temporelle, pour caractériser l'enveloppe des scénarios possibles de dispersion à courte échéance. Ainsi, les simulations probabilistes de la dispersion ont été réalisées à l'aide des ensembles météorologiques à haute résolution (PEARO) de Météo-France composés de 16 membres, qui sont validés à l'aide des observations météorologiques issues des réseaux d'observations de Météo-France et de l'IRSN, puis post-traités¹ et couplés au modèle de dispersion atmosphérique à courte distance pX, qui est de type à bouffées gaussiennes, développé par l'IRSN (Figure 3.1). La chaîne de calcul de la dispersion PEARO-pX, ainsi mise en place, a été évaluée et validée dans le cas de la dispersion du ⁸⁵Kr rejeté dans l'atmosphère par l'usine Orano de La Hague au Nord du Cotentin (Nord-Ouest de France) lors du procédé de retraitement des déchets nucléaires.

1. post-traitement = extraction des variables d'intérêt + projection sur une grille cartésienne + interpolation + calcul de stabilité atmosphérique (c.f., Annexe B).

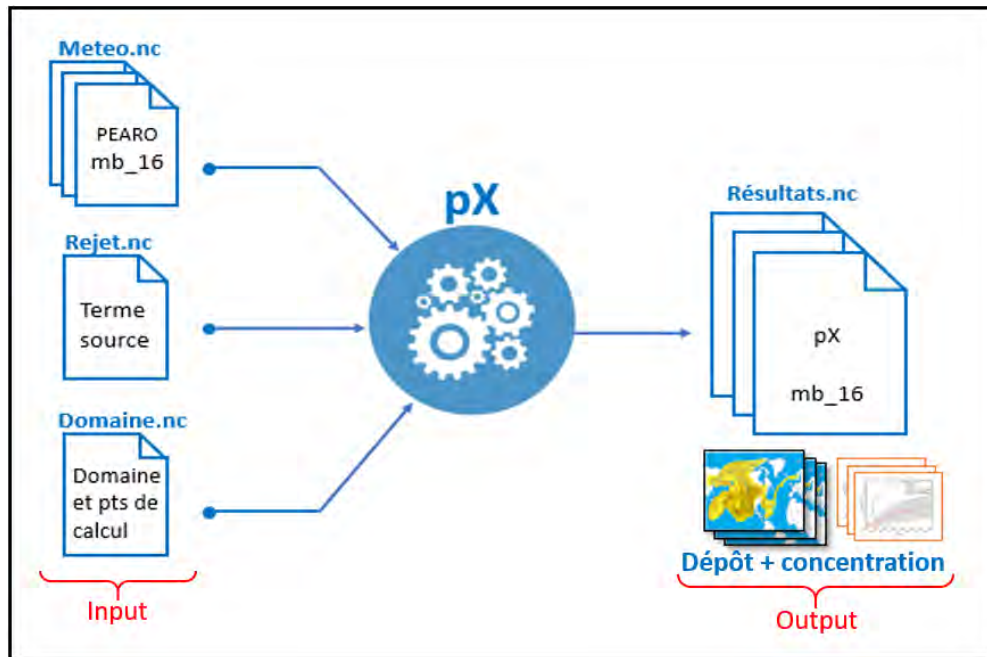


FIGURE 3.1 – Chaîne de traitement PEARO-pX permettant de générer des ensembles de la dispersion à l'aide du modèle pX alimenté par les ensembles météorologiques PEARO et les données de rejet du ^{85}Kr fournies par l'usine Orano La Hague.

Les données du rejet au cours du temps (terme source) ont été mises à disposition avec une bonne précision (fréquence de 10 min), et les observations radiologiques du ^{85}Kr utilisées dans ce travail ont été réalisées dans le cadre d'une campagne de mesures continues de l'activité volumique du ^{85}Kr qui a été menée depuis Novembre 2020 par le Laboratoire de Radioécologie de Cherbourg dans une dizaine de points de mesures (huit stations utilisées dans cette étude), dans le cadre du projet DISKRYNOC (c.f., Chapitre 2, Section 2.2.4).

Pour évaluer la performance statistique des simulations PEARO-pX (et également AROME-pX), deux scores probabilistes ont été développés, permettant de comparer les simulations aux observations : les courbes ROC (Relative Operating Characteristic) et le score PSS (Peirce Skill Score).

Les principales conclusions tirées dans cette étude sont :

- L'utilisation d'un jeu de données original, récent et complet de mesures continues de la concentration du ^{85}Kr dans l'air, combiné à un terme source bien connu, permet de réaliser une validation robuste des simulations de la dispersion atmosphérique à courte et moyenne distance dans une zone à topographie complexe.
- L'utilisation des prévisions probabilistes pour la dispersion atmosphérique améliore la prévision de dépassements de seuil de concentration par rapport aux prévisions déterministes.

- En modélisation d'ensemble, le “*seuil de décision*” est un paramètre qui caractérise la qualité d'un système de prévision, et il est défini comme le nombre de membres à partir duquel la survenue d'un événement devient très probable. Dans le cas des simulations PEARO-pX un seuil de décision optimal égal à 3 membres a été obtenu. Ce résultat signifie que, d'un point de vue opérationnel, lors d'un accident nucléaire, des actions de protection doivent être mises en place dès lors qu'un dépassement de seuil est prévu par au moins trois membres de l'ensemble PEARO-pX.

L'étude a été faite dans une configuration particulière, et on peut s'interroger sur la généralisation des résultats obtenus. On note que cette étude présente deux particularités principales : (i) la première est liée au domaine géographique sur lequel l'étude a été réalisée. Ce domaine a été choisi grâce à la densité importante des observations météorologiques et radiologiques qu'il contient. (ii) La deuxième particularité est liée à l'ignorance de l'effet du dépôt humide dans le processus de la dispersion, vu que le traceur atmosphérique utilisé (^{85}Kr) est chimiquement inerte (gaz noble). Ainsi, pour rendre les résultats de cet article plus généraux, il semble intéressant de valider la chaîne de modélisation mise en place sur d'autres cas d'étude avec des domaines plus homogènes ayant des orographies différentes, et des rejets chimiquement actifs, comme le cas du Radon-222 (Quérel et al., 2022), afin de tenir compte de l'effet des précipitations lors de la dispersion atmosphérique des radionucléides.

3.2 Article : Combining short range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles : probabilistic indicators and evaluation during a ^{85}Kr field campaign



Combining short-range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles: probabilistic indicators and evaluation during a ^{85}Kr field campaign

Youness El-Ouartassy^{1,2}, Irène Korsakissok², Matthieu Plu¹, Olivier Connan³, Laurent Descamps¹, and Laure Raynaud¹

¹CNRM, University of Toulouse, Météo-France, CNRS, 31057, Toulouse, France

²Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), PSE-SANTE/SESUC/BMCA, 92260, Fontenay-aux-Roses, France

³Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), PSE-ENV/SRTE/LRC, 50130, Cherbourg-En-Cotentin, France

Correspondence: Youness El-Ouartassy (youness.el-ouartassy@meteo.fr)

Received: 13 July 2022 – Discussion started: 4 August 2022

Revised: 2 November 2022 – Accepted: 17 November 2022 – Published: 16 December 2022

Abstract. Numerical atmospheric dispersion models (ADMs) are used for predicting the health and environmental consequences of nuclear accidents in order to anticipate countermeasures necessary to protect the populations. However, these simulations suffer from significant uncertainties, arising in particular from input data: weather conditions and source term. Meteorological ensembles are already used operationally to characterize uncertainties in weather predictions. Combined with dispersion models, these ensembles produce different scenarios of radionuclide dispersion, called “members”, representative of the variety of possible forecasts. In this study, the fine-scale operational weather ensemble AROME-EPS (Applications of Research to Operations at Mesoscale-Ensemble Prediction System) from Météo-France is coupled with the Gaussian puff model pX developed by the IRSN (French Institute for Radiation Protection and Nuclear Safety). The source term data are provided at 10 min resolution by the Orano La Hague reprocessing plant (RP) that regularly discharges ^{85}Kr during the spent nuclear fuel reprocessing process. In addition, a continuous measurement campaign of ^{85}Kr air concentration was recently conducted by the Laboratory of Radioecology in Cherbourg (LRC) of the IRSN, within 20 km of the RP in the North-Cotentin peninsula, and is used for model evaluation.

This paper presents a probabilistic approach to study the meteorological uncertainties in dispersion simulations at local and medium distances (2–20 km). First, the quality of AROME-EPS forecasts is confirmed by comparison with observations from both Météo-France and the IRSN. Then, the probabilistic performance of the atmospheric dispersion simulations was evaluated by comparison to the ^{85}Kr measurements carried out during a period of 2 months, using two probabilistic scores: relative operating characteristic (ROC) curves and Peirce skill score (PSS). The sensitivity of dispersion results to the method used for the calculation of atmospheric stability and associated Gaussian dispersion standard deviations is also discussed.

A desirable feature for a model used in emergency response is the ability to correctly predict exceedance of a given value (for instance, a dose guide level). When using an ensemble of simulations, the “decision threshold” is the number of members predicting an event above which this event should be considered probable. In the case of the 16-member dispersion ensemble used here, the optimal decision threshold was found to be 3 members, above which the ensemble better predicts the observed peaks than the deterministic simulation. These results highlight the added value of ensemble forecasts compared to a single deterministic one and their potential interest in the decision process during crisis situations.

1 Introduction

Accidental releases of radioactive pollutants into the atmosphere can have a serious impact on human health and environment (Aliyu et al., 2015; Nie et al., 2021). The dispersion of radionuclides released into the atmosphere depends on the physicochemical properties of the released substances, the emission parameters (e.g., source elevation, timing, and duration of the release), and meteorological conditions at the accident site (e.g., wind speed and direction) (Girard et al., 2014). In order to forecast the dispersion of radionuclides during the early phase of nuclear accidents and to support decisions and warnings, atmospheric dispersion models (ADMs) are commonly used to predict the transport of radioactive pollutants through the atmosphere as well as the quantities of radioactive material deposited on the ground (Korsakissok et al., 2013). This information is essential for decision makers in order to anticipate the countermeasures necessary to protect the population against contamination.

1.1 Uncertainties and ensemble simulations

The outputs from ADM simulations suffer from significant uncertainties that limit the confidence in them when they are used in an operational context (Korsakissok et al., 2020; Leadbetter et al., 2020). The three main sources of these uncertainties have been discussed by Rao (2005) and by Mallet and Sportisse (2008). The first one is related to the source term, which is an essential input data. For a prognosis of potential releases, it may be defined from a priori assumptions (pre-defined source term), modeling of physical processes at stake within the reactor, along with knowledge of the damaged installation status. In case of an ongoing or past release, when observations are available in the environment, the source term can be reconstructed by inverse methods. For this purpose, IRSN (French Institute for Radiation Protection and Nuclear Safety) has developed inverse modeling methods, which are methods based on mathematics that aim to minimize the difference between ADM outputs and in situ measurements (Saunier et al., 2013, 2020).

The second main source of uncertainty is related to the meteorological forecasts that are given as input to ADMs. Weather information used for dispersion prediction is, frequently, provided by numerical weather predictions (NWP) as 3D or 4D physical fields. To take into account the meteorological uncertainties on dispersion simulations, two methods have commonly been used. The first method is the addition of random perturbations to weather inputs (Girard et al., 2014, 2020). The second one is the use of meteorological ensembles (Straume et al., 1998).

Some studies have used operational ensemble prediction systems (EPS) as input for dispersion models in the case of the Fukushima accident (Sørensen et al., 2016; Kajino et al., 2019; Le et al., 2021), while others used EPS for hypothet-

ical nuclear accident scenarios (Sørensen et al., 2019, 2020; Korsakissok et al., 2020; Leadbetter et al., 2022). These studies include either meteorological uncertainties only, or sometimes both meteorological and source term uncertainties. All these studies were carried out at long distance and the ensembles used to represent weather uncertainties had coarse spatial and temporal resolutions, except Leadbetter et al. (2022), who also used fine-scale weather ensembles with a horizontal resolution of about 2.5×2.5 km and 70 vertical levels. For example, De Meutter et al. (2016) studied the use of meteorological ensembles at hemispheric scale to predict radionuclide peaks coming from radiopharmaceutical facilities, and De Meutter and Delcloo (2022) studied it at continental scale for the same application, using the ECMWF-ERA5 ensemble at a horizontal resolution of 63 km. In the case of the Fukushima disaster in Japan, Le et al. (2021) investigated the dispersion of radionuclides using the operational ECMWF-ENS (Leutbecher and Lang, 2014) with a spatial resolution of approximately 25×25 km and 3 h time steps, using several source terms from literature. In Le et al. (2021) and De Meutter and Delcloo (2022), an evaluation of the dispersion ensembles was performed by comparison to radiological observations in the environment and the results illustrate the added value of the use of weather ensembles for dispersion simulations. In a hypothetical case study, Leadbetter et al. (2022) explored the uncertainties coming only from weather conditions at synoptic scale, by using the operational Met Office's EPS named MOGREPS-G (Tennant and Beare, 2014) with a spatial resolution of approximately 20×20 km and 3 h time steps. Although this approach allowed the demonstration of the ability of meteorological ensembles to perform atmospheric dispersion results more skillfully than results produced with deterministic meteorology, it did not evaluate the performance of the ensemble dispersion simulations in the case of a realistic release. While most applications of meteorological ensembles cited above were focused on hemispheric or continental scale, the impact of meteorological uncertainty on dispersion forecasts at local scale (in the range of 2 to 20 km) has received less attention. With the development of kilometer-scale EPS (Bouttier et al., 2012), the feasibility and interest for such studies are rising. High-resolution meteorological ensembles were used in the case of a fictitious nuclear release (Sørensen et al., 2017, 2020; Korsakissok et al., 2020), but no comparison to observations was made. The realistic performance of ADM outputs can be assessed only by using well-known real source terms combined with reliable tracer measurements appropriate for the studied scale, as discussed in Sect. 1.2.

The third source of uncertainty arises from approximations for resolving atmospheric processes in the ADM, such as, for instance, turbulent diffusion and deposition (Leadbetter et al., 2015; Girard et al., 2016). A possible approach to include these model-related uncertainties is to use a multi-

model ensemble. This approach was extensively investigated in Galmarini et al. (2004b, a) by using a set of different ADMs to construct an ensemble of simulations, either with identical or different input data, to represent the modeling uncertainties and the results showing that the ensemble simulations allows the reduction of the uncertainty related to the deterministic simulation. This approach has been used for various applications, including the Fukushima accident (Draxler et al., 2015; Sato et al., 2018). However, this multi-model approach differs from the more systematic method based on meteorological ensembles in the sense that the latter are built for each member to have the same probability. In this paper, we use a single ADM, but the influence of model-related variables such as atmospheric turbulent parameters is discussed.

1.2 Dispersion datasets at local scale

There is a large panel of atmospheric dispersion tracer experiments for model validation at local scale (Olesen, 1998), both for rural and urban areas. However, most of the experiments were conducted within a few kilometers of the source. There is a lack of tracer measurement experiment studies ranging from the short to medium distances (2–20 km). At such scales, the ^{85}Kr can be a good tracer since it is an inert gas with a long half-life ($\tau_{1/2} = 10.7$ years) and its radioactive decay is negligible at these distances. The main sources of the ^{85}Kr in the atmosphere are reprocessing plants (RPs) of spent nuclear fuel, from which the ^{85}Kr release can be known with a good accuracy (described in Sect. 2.2).

As an example, the work conducted in the Laboratory of Radioecology in Cherbourg (LRC) of IRSN, presented by Connan et al. (2013), is one of the rare studies that explored the dispersion of radionuclides at distances between 5 and 50 km. In this previous paper, continuous ^{85}Kr measurements at a 1 min time period were carried out at three stations and combined with well-known discharge data which were provided by the nuclear fuel reprocessing plant of Orano La Hague (later called RP), located in the North-Cotentin peninsula (northwestern France). These data were then used to perform dispersion simulations, but, with only three stations, the dataset was not large enough to capture the spatial spread of released radioactive material. From these previous studies arose the need for a campaign using more observation stations, spatially representative of the area, along with a longer time-period to make the conclusions more statistically robust. These previous studies also showed that the assumption of homogeneous meteorological data, using a single meteorological observation as input, were responsible for a large part of simulation errors (Korsakissok et al., 2016), thus highlighting the need to account for meteorological uncertainties.

1.3 Objectives of the paper

The main purpose of the present article is to investigate the impact of the meteorological uncertainties on local-scale dispersion. The operational high-resolution meteorological ensembles AROME-EPS (Applications of Research to Operations at Mesoscale-Ensemble Prediction System) (Bouttier et al., 2012) and AROME-deterministic NWP (Seity et al., 2011) of Météo-France are used as input of the IRSN short-range Gaussian puff model pX (Soulhac and Didier, 2008; Mathieu et al., 2012; Korsakissok et al., 2013) around the RP facility at local scales (less than 20 km). In this area, there is a dense weather observation network (from both IRSN and Météo-France) that has been used to validate AROME-EPS ensembles before combining them with the dispersion model. Measurements of ^{85}Kr air concentration at eight fixed points located at various distances, from 2 to 20 km, and at various orientations from the RP facility were carried out by IRSN in the framework of the DISKRYNOC project (Dispersion of KRYpton in the North-Cotentin). This dataset is presented for the first time in this paper, and is used to evaluate the probabilistic performance of ensemble dispersion simulations. Thus, the originality of this work can be summarized in three points: (i) the use of a unique and original dataset of continuous data of ^{85}Kr air concentration measurements (every 1 min or 10 min) over a relatively long period, (ii) the evaluation of an ensemble of dispersion simulations using a fine-scale meteorological ensemble with in situ observations, and (iii) an innovative method developed to assess the probabilistic performance of the dispersion ensembles.

The outline of the article is as follows: in Sect. 2, the source term, the observations, and the models used in the study are described. Section 3 presents the verification of AROME-EPS against wind measurements, and then the ensemble dispersion simulations are presented and discussed in Sect. 4. Conclusion and perspectives are provided in Sect. 5.

2 Case study, data and models

2.1 Case study

The present study focuses on the dispersion of ^{85}Kr at short and medium distances (less than 20 km), in the North-Cotentin peninsula located in the northwest of French territory (Fig. 1). This geographical area is where the nuclear fuel reprocessing plant of Orano La Hague (later called RP) is located (Fig. 1). ^{85}Kr is a β^- and γ emitting radioactive noble gas that is naturally present in the environment, but mainly released into the atmosphere during the reprocessing of spent nuclear fuel. Background levels of ^{85}Kr in the atmosphere, excluding an industrial plume, are currently below 2 Bq m^{-3} (Bollhöfer et al., 2019). Within 2 km of the La Hague RP, air activity concentrations of ^{85}Kr can reach $100\,000 \text{ Bq m}^{-3}$ (Connan et al., 2014). At distances in the order of 20 km, the maximum measurable activity concentrations are generally

less than $10\,000\text{ Bq m}^{-3}$ and beyond a few tens of kilometers of RP; the activities in ^{85}Kr are too low to be measurable in real time (Connan et al., 2013).

The potential interest of the La Hague area is that the release rate of ^{85}Kr emitted by the RP into the atmosphere is known with a good accuracy. In addition, there is a sufficient density of meteorological measurements combined with ^{85}Kr radiological air concentration measurements. Meteorological measurements are carried out by Météo-France on a regular basis. The IRSN's Laboratory of Radioecology in Cherbourg (LRC) regularly performs meteorological and radiological measurements in the framework of measurement campaigns. Additional meteorological and air concentration measurements are carried out by Orano for the environmental monitoring of the RP. For these reasons, the La Hague experimental site is an ideal environment for the study and validation of atmospheric dispersion simulations.

Past validation studies conducted in this framework have shown that dispersion simulation results are quite sensitive to the meteorological data used as input (Connan et al., 2013). The North-Cotentin peninsula of La Hague is a rocky area of approximately 15 km located at 190 m a.s.l. above cliffs, surrounded by the sea less than 5 km in most directions (Fig. 1). Such a complex terrain leads to spatially heterogeneous wind fields that may be difficult to accurately forecast. Therefore, this case study should provide good insights to examine the influence of meteorological uncertainties on atmospheric dispersion simulations.

2.2 Source term of ^{85}Kr

The La Hague RP has two production units called UP2-800 (1.87941° W , 49.67705° N) and UP3 (1.87606° W , 49.67705° N). Each of the two units has a stack for the discharge of ^{85}Kr with a height of 100 m and the two stacks are 200 m apart (Leroy et al., 2010).

During the reprocessing process of spent nuclear fuel, ^{85}Kr is intermittently released into the atmosphere from stacks of the plant during 30–45 min, separated by approximately 10 min intervals without releases. Depending on the industrial activity, long periods (a few hours to a few days or weeks) without releases are frequent. Both plants can operate separately and the release can come from one or both stacks. Release fluxes of ^{85}Kr (measured at a frequency of 10 min) were provided by the Orano RP for the study period. The radioactive concentration of the released ^{85}Kr depends on the burn-up of the reprocessed spent fuel and the processing rate of the plant (Connan et al., 2013).

The activity in ^{85}Kr released from the factory by the stacks (confidential data) is known with a time step of 10 min and an uncertainty of measurement in the order of 10 % in period of release (two channels of measurements for each stack). The discharge being intermittent, this 10 min time step ensures a precision that is indispensable for atmospheric dispersion

studies. From 2019 to 2021, annual releases of the ^{85}Kr varied from 294 to 379 PBq yr^{-1} (Orano, 2021).

In this paper, the atmospheric dispersion of ^{85}Kr is studied along the continuous period of 2 months ranging from 1 December 2020 to 31 January 2021. This period comprises the detection of an important number of ^{85}Kr events at all measurement sites (Fig. 2) due to favorable wind direction.

2.3 Measurements campaign of ^{85}Kr in the North-Cotentin province

The IRSN routinely monitors ^{85}Kr air concentrations close to the RP to not only study the transfer of radionuclides in the environment, but also validate the ADMs and improve the understanding of radionuclide dispersion in various atmospheric conditions (Maro et al., 2002, 2007; Leroy et al., 2010; Connan et al., 2014). Krypton-85 (^{85}Kr) is a very good tracer of atmospheric dispersion in short and medium distances since it is an inert gas (noble gas), it is not chemically or physically reactive, so it does not get depleted by rain (wet scavenging) or by dry deposition processes. In addition, ^{85}Kr has a sufficiently long half-life ($\tau_{1/2} = 10.7$ years) for its radioactive decay to be negligible at short and medium distances.

Since November 2020, IRSN has been carrying out a continuous ^{85}Kr air measurement campaign in several locations chosen at different distances and directions from the RP, as part of the DISKRYNOC project. This project aims to provide a comprehensive new observational dataset for model validation purposes. In this study, this dataset is used to acquire feedback on the use of meteorological ensembles to quantify the associated uncertainties. The eight closest air sampling locations from the RP used in this article, described in Table 1 and shown in Fig. 1, are as follows: PTILH (Instrumented Technical Platform of La Hague), Urville, Ludiver, Octeville, LRC, Digulleville, Beaumont, and Gréville. The IRSN is the owner of the first five stations, while the last three are Orano stations. The measurements have been carried out since mid-November 2020 and are expected to extend over approximately 18 months. This extended time period should provide a significant number of observations at all measurement sites. It should compensate for periods without reprocessing activity or with a wind direction towards the sea. Typical values of ^{85}Kr air concentrations in these stations range from tens to thousands Bq m^{-3} (depending on the distance from the RP, wind direction, plant reprocessing activities and atmospheric conditions). Continuous measurements are being performed every minute in the IRSN stations and every 10 min in the RP stations.

The activity concentration in the air is determined by β counting in a Berthold LB123 or LB134 gas-filled proportional counter calibrated with a specially fabricated common ^{85}Kr source (Gurriaran et al., 2001). This method is only useful in near fields (less than 30 km) where the ^{85}Kr air concentration is sufficiently high. The same method has been used



Figure 1. Location of North-Cotentin peninsula (left panel) and map of the monitoring sites (right panel). The dots and squares indicate the locations of the ^{85}Kr measurement stations carried out by IRSN and RP, respectively, as part of the DISKRYNOC campaign. The RP facility location is marked with a star. The circles indicate the locations of the 3D-wind measurement sites (from IRSN or Météo-France).

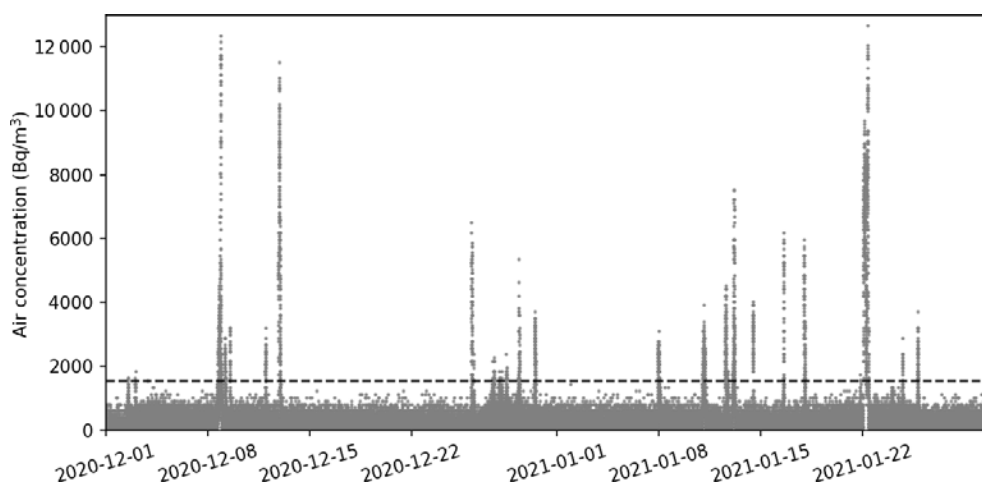


Figure 2. ^{85}Kr air concentration measurements carried out at the LRC (Fig. 1) from 1 December 2020 to 31 January 2021. The horizontal dashed line shows the air concentration threshold (1545 Bq m^{-3}) above which peaks are considered.

by Connan et al. (2014) and it has been documented by Gurriaran et al. (2004).

2.4 3D wind observations

Evidence from past studies has shown that (in the absence of deposition) 3D wind field is one of the most sensitive meteorological parameters for ADMs (Girard et al., 2014). For this reason, the performance of the AROME-EPS forecasts in terms of wind speed and direction should be assessed before they may be used for atmospheric dispersion. For this purpose, four kinds of observation data of wind have been used:

- The real-time ground observation acquisition network of Météo-France called RADOME, which has about

550 automatic ground observation stations spread over the whole French territory, among which two stations are located in the study area and are shown in Fig. 1: La Hague (1.9398° W , 49.7251° N) located $\sim 2.5 \text{ km}$ from the RP plant, and Gonneville (1.4635° W , 49.6526° N) located $\sim 31 \text{ km}$ from the RP plant. These stations provide continuous hourly measurement data of 10 m wind, temperature, humidity, rainfall, and surface solar radiation fields.

- Vertical wind profile measured by Doppler lidars (Light Detection And Ranging). Atmospheric lidars are currently used for atmospheric measurements of aerosols and wind, and thus allow for climate monitoring, air quality, or cloud monitoring (Werner, 2005; Wu et al.,

Table 1. Description of the 8 localizations of ^{85}Kr air concentration measurement stations used in this article.

Stations	Long/Lat	Height above ground	Distance from RP facility	Measurements time step
PTILH	1.8733° W, 49.6949° N	1.5 m	2 km	1 min
Urville	1.7431° W, 49.6607° N	1.5 m	10.4 km	1 min
Ludiver	1.7283° W, 49.6297° N	1.5 m	12.7 km	1 min
Octeville	1.6579° W, 49.6211° N	1.5 m	17.7 km	1 min
LRC	1.6458° W, 49.6347° N	2 m	18 km	1 min
Digulleville	1.8595° W, 49.7001° N	2 m	2.6 km	10 min
Beaumont	1.8358° W, 49.6613° N	2 m	4.2 km	10 min
Gréville	1.8097° W, 49.6682° N	2 m	5.2 km	10 min

2022). A Doppler lidar (version Leosphere Windcube 2) was recently installed by the IRSN's LRC, on the PTILH measurement site, located ~ 2 km from the RP plant (Table 1). This lidar provides wind data (speed and direction) at 10 min intervals on 13 vertical levels: 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160, 180, 200, 220, 240, 260, and 280 m.

- Ultrasonic measurements acquired by Sodar (Sonic Detection And Ranging), which is a remote-sensing instrument often used in meteorology for the 3D acquisition of wind fields (speed and direction) on several vertical levels, using the Doppler effect on sound-wave levels (Tamura et al., 2001).

The Sodar measurements used in this work come from the instrument located ~ 200 m west (1.8901° W, 49.6800° N) of the RP facility, which provides measurements on 6 vertical levels: 0, 10, 50, 100, 150, and 200 m.

- Ultrasonic measurements by the LRC's anemometer (1.6458° W, 49.6347° N) installed at a height of 13 m above the ground. This instrument provides 10 min wind measurements.

Thus, five wind measurement points are available and used to evaluate the AROME-EPS meteorological ensemble over the two-month period of this work. This validation process has been done near the surface and on several vertical levels of the atmospheric boundary layer (ABL) since the knowledge of the evolution of the meteorological fields throughout the lower atmosphere with a good accuracy is beneficial for a short-distance ADM to describe the physical processes (e.g., turbulence) occurring in the ABL.

2.5 Description of AROME and AROME-EPS

The Météo-France NWP model, AROME, used in this study is summarized in Table 2 and extensively documented in Seity et al. (2011). AROME is a non-hydrostatic kilometer-scale NWP-limited area model. This model covers a geographical domain of about 1000×1000 km, centered over

the French territory with 90 vertical levels and a horizontal resolution of 1.3 km. The lateral and upper boundary conditions are provided by the operational global NWP model ARPEGE (Courtier et al., 1991) of Météo-France. AROME runs 4 times per day, up to at least a 42 h range, starting from the initial times 00:00, 06:00, 12:00, and 18:00 UTC. Its 3D-Var data-assimilation scheme (Brousseau et al., 2011) is a state-of-the-art assimilation algorithm that produces analyses at 1.3 km resolution by correcting the model state at hourly time steps using different kinds of meteorological observations (in situ ground-based measurements, radar reflectivities and winds, satellite radiances, among others).

The AROME-EPS (Bouttier et al., 2016) model used in this article is a 16-member ensemble based on the AROME model at 2.5 km (Table 2). The ensemble runs 4 time per day, up to at least a 45 h range, at 03:00, 09:00, 15:00, and 21:00 UTC. The 16 AROME-EPS perturbed initial conditions are built from the AROME 3D-Var analyses on which perturbations from the ensemble data assimilation (EDA) at 3.25 km resolution are added (Raynaud and Bouttier, 2016). The AROME-EDA comprises 25 members that are obtained by perturbing the observations and the model state during the assimilation process. The outputs from both are combined and interpolated to 2.5 km to produce the initial conditions of the AROME-EPS. The lateral and upper boundary conditions (Bouttier and Raynaud, 2018) are provided by the Météo-France ARPEGE-EPS operational global EPS (Descamps et al., 2015).

Besides the initial errors, forecast uncertainty also arises from the dynamic part of the model (e.g., spatial and temporal discretization of the equations that represent phenomena whose characteristic scale is larger than the mesh size), or from the physical part of the model (e.g., corrective terms added to the dynamic equations to take into account the effect of phenomena whose scale is smaller than the mesh size). To account for model uncertainties in the AROME-EPS forecasts, the stochastically perturbed parametrization tendencies (SPPT) scheme is used (Palmer et al., 2009; Bouttier et al., 2012). This method consists of adding random perturbations to the physics tendencies in models.

Table 2. Description of AROME and AROME-EPS.

	AROME	AROME-EPS
Domain	Western Europe, centered on France ($\sim 1000 \times 1000$ km)	
Size	Deterministic (1 forecast)	16 members
Vertical levels	90 [5 m–10 hPa]	90 [5 m–10 hPa]
Horizontal resolution	1.3 km	2.5 km
Temporal resolution	1 h	1 h
Forecast initial time	00:00, 06:00, 12:00, 21:00 UTC	03:00, 09:00, 15:00, 21:00 UTC
Forecast range	48, 42, 48, 42 h	45, 51, 45, 51 h

2.6 Description of the pX model

The IRSN's Gaussian puff model, pX, used in this work is part of the operational platform C3X (Tombette et al., 2014), which is used by IRSN Emergency Response Center in case of an accidental radioactive release. The pX model is used to simulate the atmospheric dispersion of radionuclides on short and medium distances (500 m–50 km) (Korsakissok et al., 2013; Mathieu et al., 2012). The principle of such a dispersion model is based on the following assumptions:

- The release comes from a point source.
- A continuous release can be discretized into a series of puffs transporting a given amount of pollutants.
- Within each puff, the meteorological variables can be considered homogeneous.
- The concentration of pollutant in the puff can be represented by a Gaussian law in each of the three directions (Appendix B).

For an instantaneous release of a mass Q of a given radionuclide, the concentration c at a given point (x, y, z) and a time t is given by the following:

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{2/3} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \times \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{(x-x_0)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y-y_0)^2}{\sigma_y^2} + \frac{(z-z_0)^2}{\sigma_z^2} \right) \right], \quad (1)$$

where σ_x , σ_y , and σ_z are the Gaussian standard deviations of the diffusion of the puffs over time in the three directions of space and (x_0, y_0, z_0) is the position of the mass center of the puff, which is transported by the mean wind flow. If x is the mean wind direction, and U is the mean wind speed in the x direction, then the position of the center of the puff at each time $t + dt$ from its position at time t is

$$\mathbf{x}_0(t + \Delta t) = \mathbf{x}_0(t) + \mathbf{U}(t)\Delta t. \quad (2)$$

This advection scheme allows the transportation of the puffs' mass centers through a non-stationary and heterogeneous

wind field. In addition, the puffs are growing over time to represent the plume's mixing by atmospheric turbulence. This is represented in Eq. (1) by the standard deviation σ_x , σ_y , and σ_z that increase over time. This increase of plume spread depends on the atmospheric stability and is described by empirical standard deviation laws. In the pX model, the laws of Doury (Doury, 1976) or Pasquill (Pasquill, 1961) can be used. In this work, Pasquill stability was determined using two methods: (i) Pasquill–Turner (Turner, 1969) and (ii) the temperature gradient between 10 and 100 m in the meteorological forecasts (Seinfeld and Pandis, 1998), i.e., three stability diagnoses which are compared in this work (Appendix A1).

For a continuous emission of release rate q_s (in Bq s^{-1}) that is discretized into a series of N puffs, each puff i containing a mass $Q_i = q_s \Delta t$, the concentration c at a given point is computed as the sum of the contribution of all puffs:

$$c(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^N c_i(x, y, z, t), \quad (3)$$

where c_i is given by Eq. (1).

Finally, the mass of the material transported by the puff is depleted by wet and dry deposition as well as by radioactive decay. In our case, the transported mass will be assumed to remain constant over time, since ^{85}Kr is an inert gas (no deposition) with a long half-life (no radioactive decay at short distance) as shown previously. Equation (1) is also modified to take into account reflections on the ground and ABL height under certain conditions. Specifically, reflections on the ABL height are considered in unstable situations (when a capping inversion is assumed).

3 AROME-EPS verification

3.1 Scores for AROME-EPS verification

Before coupling the NWP from AROME-EPS to the pX model, it is necessary to evaluate them in order to have an exhaustive overview of their quality and to take it into account in the interpretation of atmospheric dispersion simulations. For this purpose, two common scores, among others, used by the meteorological community for the evaluation of en-

semble skill, have been calculated based on the observations of 3D-wind speed and direction described in Sect. 2.4:

Bias. In order to identify the systematic deviations of AROME-EPS meteorological ensemble forecasts from the observations, the bias over all days of the period of interest for a variable X is calculated at each forecast range t by the following equation:

$$\text{Bias}(t) = \frac{1}{N_{\text{day}}} \sum_{d=1}^{N_{\text{day}}} (\langle X_{\text{mod}}^{(t,d)} \rangle - X_{\text{obs}}^{(t,d)}), \quad (4)$$

where N_{day} is the number of days of the interest period; $\langle X_{\text{mod}}^{(t,d)} \rangle$ is the AROME-EPS ensemble mean at forecast range t on day d and $X_{\text{obs}}^{(t,d)}$ is the observed value at the same instant.

Spread-skill. As shown by Fortin et al. (2014), the ability of an ensemble to represent simulation errors can be evaluated by comparing, at each forecast range, the skill (or root mean square error, RMSE) of the ensemble mean and its spread (Spd), the latter calculated relative to the ensemble mean (Raynaud et al., 2012; Charrois et al., 2016). For a variable X , the ensemble Spd and RMSE terms are defined, at each forecast range t , as follows:

$$\text{Spd}(t) = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{day}}} \sum_{d=1}^{N_{\text{day}}} \frac{1}{N_{\text{ens}} - 1} \sum_{n=1}^{N_{\text{ens}}} (X_{\text{mod},n}^{(t,d)} - \langle X_{\text{mod}}^{(t,d)} \rangle)^2}, \quad (5)$$

$$\text{RMSE}(t) = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{day}}} \sum_{d=1}^{N_{\text{day}}} (\langle X_{\text{mod}}^{(t,d)} \rangle - X_{\text{obs}}^{(t,d)})^2}, \quad (6)$$

where N_{ens} represents the ensemble size ($N_{\text{ens}} = 16$ in the case of AROME-EPS). The value of variable X given by the ensemble member n at the forecast range t is $X_{\text{mod},n}^{(t,d)}$. This diagnostic can be summarized by calculating the spread–skill ratio, which should be as close to 1 as possible. Values less than 1 (respectively greater than 1) indicate that the ensemble is underdispersive (respectively overdispersive).

3.2 Model-to-data comparison of AROME-EPS

The evaluation of the quality of AROME-EPS predictions was carried out over the two-month period considered in this study (December 2020–January 2021). This evaluation process is done independently for each of the 03:00, 09:00, 15:00, and 21:00 UTC forecasts for all stations described in Sect. 2.4. The results for all forecasts and stations are similar. Therefore, only the results of the 15:00 UTC forecast are shown here for two configurations: (i) at 10 m height (two RADOME stations: La Hague and Gonnevillle) and (ii) at several levels of ABL for stations where vertical wind profile measurements are available (lidar at PTLIH and Sodar at the RP site).

Figure 3 shows the ensemble biases in terms of 10 m wind speed and direction aggregated from La Hague and Gonnevillle stations. In the case of wind speed, the ensemble mean is above the observation for most of the forecast ranges, resulting in a slight systematic bias which varies between 0.71 and 1.45 m s^{−1}. The evolution of both the forecasts and observations (and eventually the resulting bias) shows a marked diurnal cycle. The maximum bias is around 15:00 UTC, corresponding to the forecast range of 25 h, with approximately no bias in the first forecast range. For the wind direction, there is a good average performance of the model as shown by the good agreement between the averages of the forecasts and observations. The mean bias of the model oscillates around zero, with maximum and minimum values of +7.8 and −13.3°, respectively.

Figure 4 shows the ensemble spread and skill evolution over the forecast range. For wind speed, the spread of the ensemble is consistent with the RMSE with respect to the observations, with a slight underdispersion, while for wind direction, the ensemble spread is above the RMSE at all forecast ranges. This overdispersion in terms of wind direction should be kept in mind when interpreting the ensemble atmospheric dispersion simulations.

To complement this evaluation at 10 m height, it is worth examining the quality of the AROME-EPS meteorological ensembles at different vertical levels in the lower atmosphere. To do so, the bias and the spread–skill ratio have been calculated at several vertical levels above ground. The results at the PTLIH station are presented in Fig. 5 and summarized in Table 3. The wind speed forecasts are slightly less biased and overdispersive at higher altitudes than at lower ones, with an overdispersion more pronounced in the earlier forecast ranges. The latter is probably due to an imperfect accounting of modeling and/or initial condition uncertainties in the perturbation process. However, the bias at 40 m (lidar measurements) and 10 m (in situ measurements) are consistent, which means that the high bias in the lower layers is probably not due to lidar measurement errors. It may be due to the representation of surface processes in AROME in this area which is characterized by a complex orography and heterogeneous surfaces (sea and land). For the wind direction, there is no significant dependency of biases and spread of the ensembles with respect to the altitudes.

To summarize, the assessment of the consistency of AROME-EPS forecasts showed that they perform well by comparison to wind speed and direction measurements in the North-Cotentin area for the selected period, despite slight errors in the wind speed forecast. The same conclusion was reached for deterministic AROME forecasts (not shown here), by calculating the bias from wind observations.

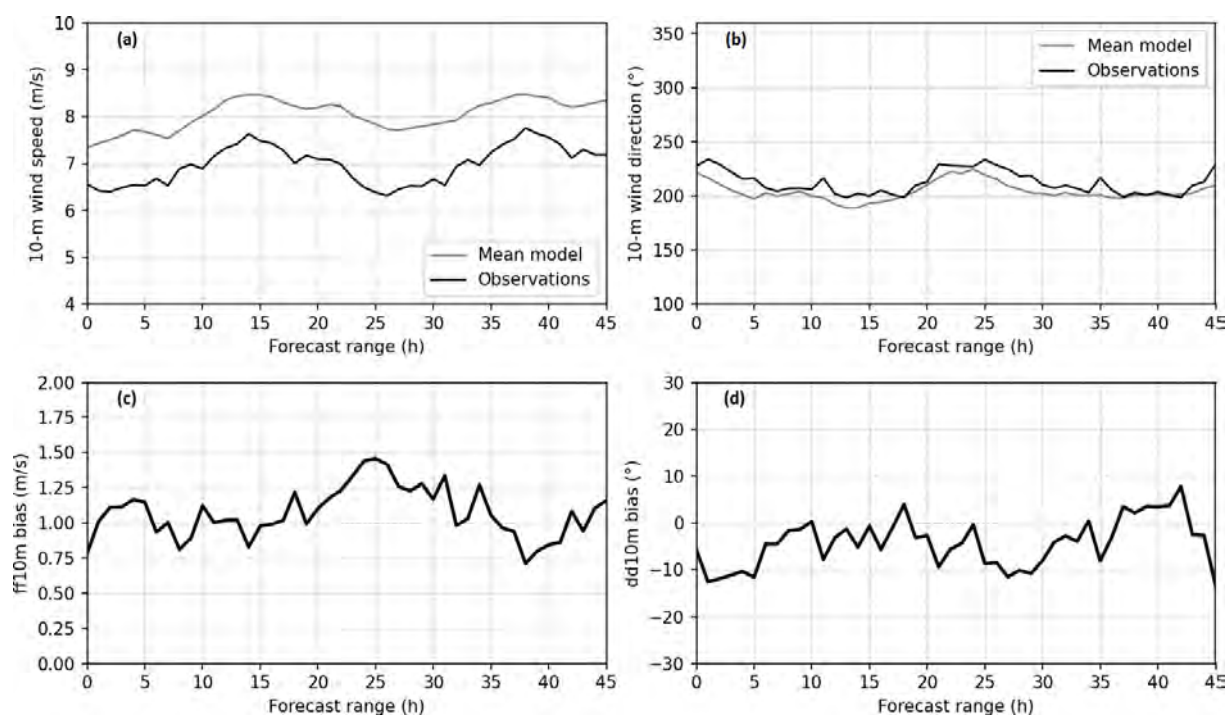


Figure 3. Ensemble mean and observations (a, b) as a function of forecast range, and the resulting bias (c, d) for both 10 m wind speed (referred to as ff10m) and direction (referred to as dd10m), aggregated from the two ground measurement stations: La Hague and Gonneville.

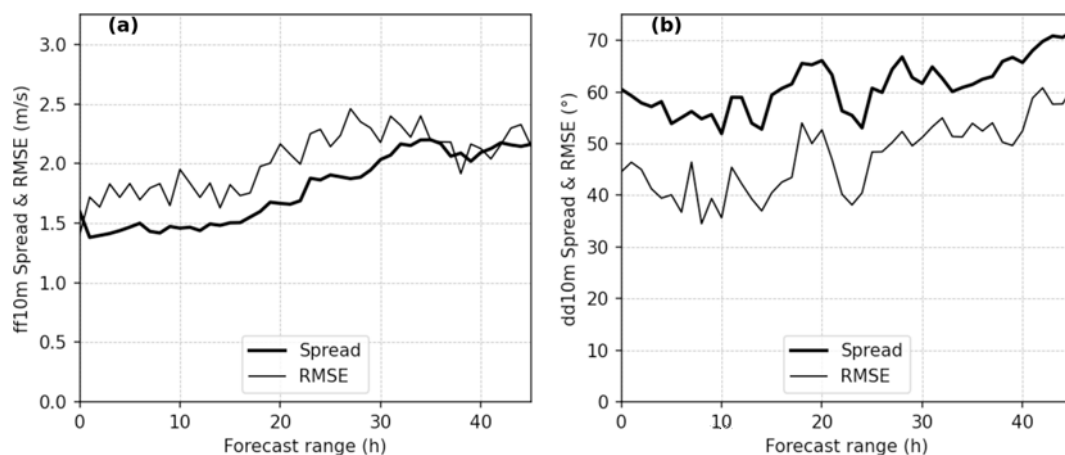


Figure 4. Ensemble spread and RMSE of the ensemble mean forecast for both 10 m wind speed (referred to as ff10m) (a) and direction (referred to as dd10m) (b) aggregated from the two ground measurement stations: La Hague and Gonneville, as a function of the forecast range.

4 Analysis of the ensemble dispersion simulations

4.1 Coupling AROME-EPS and pX model

Once meteorological forecasts from AROME-EPS have been qualified as shown in Sect. 3, they are coupled to the Gaussian dispersion model pX (Sect. 2.6). This process consists of running several simulations in parallel with the pX model, each using a different member of the AROME-EPS ensemble as input, along with the source term data provided by the

RP La Hague. This allows the generation of an ensemble of dispersion simulations composed of 16 members (hereafter called the pX ensemble). Furthermore, in order to quantify the benefit of using ensembles instead of deterministic simulations, an additional pX simulation was performed using the deterministic weather forecast from AROME as input of the model. This simulation is called deterministic pX in the following section.

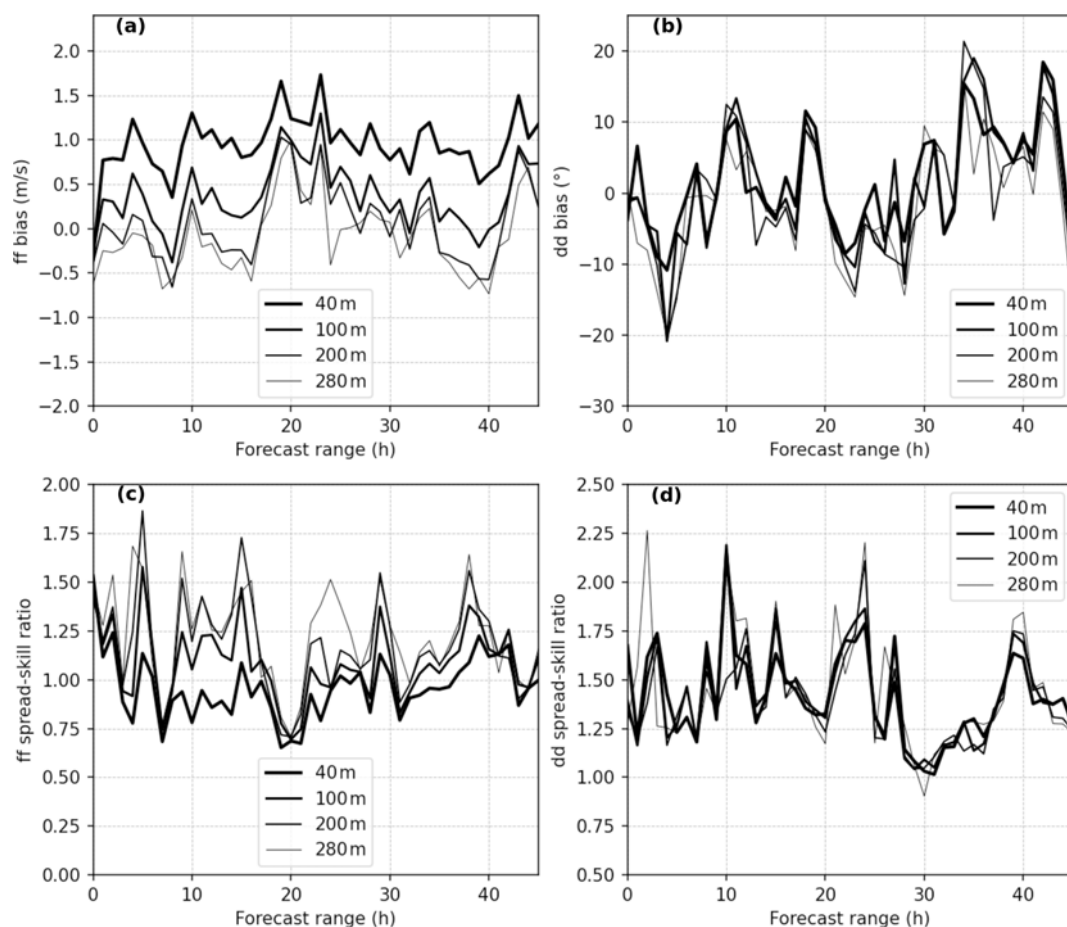


Figure 5. Bias (a, b) and spread–skill ratio (c, d) of the ensemble between 40 and 280 m above ground, for both wind speed (referred to as ff) (a, c) and direction (referred to as dd) (b, d) measured by lidar at the PTLIH station, as a function of forecast range.

4.1.1 Temporal continuity of AROME-EPS members

In the case of accidental releases that span a long time period, it is important to properly build continuous time series from several forecasts made at different initial times, without causing brutal jumps in spread between forecasts from 2 consecutive days. Besides, fine-scale weather forecasts are, usually, not available until a few hours after their start. To deal with this issue, this study proposes using the closest available forecast at the beginning of a day. In other words, to simulate a release occurring from 00:00 to 23:00 h of a day D , the AROME-EPS forecasts starting from 15:00 UTC of the day before ($D - 1$) are used. Thus, the first 8 forecast hours are skipped and the next 24 h [09:00–32:00 h] are used to cover the entire day. In the same way, the forecast starting from 15:00 UTC of day D is used to cover the day $D + 1$. Figure 6 illustrates this cycle. Then, these intervals are combined to cover the three simulation periods detailed in Table 5, by connecting each member i of day D with member i of day $D + 1$.

Note that to perform pX deterministic simulations, the deterministic weather forecasts from AROME are built in the

same way, by using the forecast starting from 12:00 UTC. In this case, the first 11 forecast hours were skipped and the next 24 h were used [12:00–35:00 h].

4.1.2 pX simulation setup

The calculation domain of pX is defined by the grid of meteorological forecasts, and the puffs that leave this domain no longer participate in the concentration calculations. Moreover, the concentration calculated on a point located on the border of the meteorological domain will only account for the contribution of the puffs inside. It is, therefore, necessary to define a simulation domain whose borders are sufficiently far from the calculation points (i.e., ^{85}Kr measurements sites in Fig. 1). Thus, a 60×60 km domain centered on the source (i.e., RP) was defined, where the meteorological forecasts were interpolated on a Cartesian grid with 2.5 km of horizontal resolution, leading to a horizontal mesh of 24×24 cells. This process was accomplished by a weather pre-processor that was developed as part of this study.

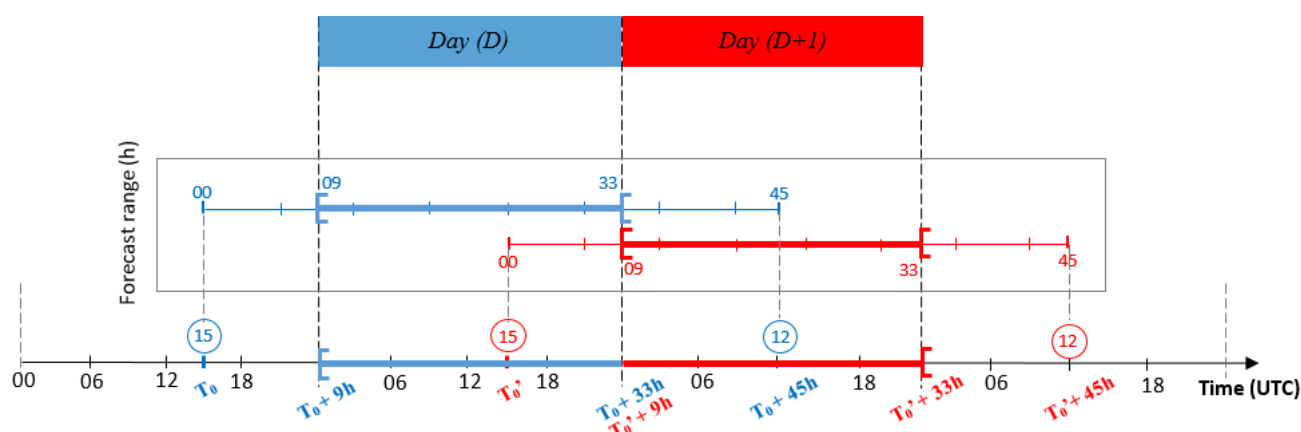


Figure 6. Illustration of meteorological forecasts used from AROME-EPS (in bold) as input to pX: the forecast starting from 15:00 UTC on a day D is used to cover the next day $D + 1$.

Table 3. The AROME-EPS ensemble bias and spread–skill ratio averaged over forecast range in the vertical levels observed by lidar located in the PTILH site.

Levels (m)	Bias		Spread–skill ratio	
	Wind speed (m s^{-1})	Wind direction ($^{\circ}$)	Wind speed	Wind direction
40	0.948	1.696	0.959	1.416
60	0.606	0.852	1.034	1.410
80	0.448	0.913	1.062	1.412
100	0.364	1.002	1.089	1.416
120	0.217	0.581	1.116	1.418
140	0.141	0.490	1.134	1.412
160	0.095	−0.421	1.145	1.407
180	0.053	−0.468	1.151	1.402
200	0.062	−0.305	1.171	1.386
220	0.042	−0.915	1.182	1.356
240	0.023	0.247	1.200	1.393
260	−0.021	−0.790	1.216	1.395
280	−0.078	−1.246	1.226	1.444

Considering the objectives of this work, only the first 25 vertical levels outputs from AROME (10–3000 m) are used here to cover the entire ABL. The ABL height is diagnosed from AROME forecasts as the lowest altitude where the turbulent kinetic energy is below $0.01 \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$. As a result, it may happen that this diagnostic reaches unrealistically low values, as low as 10 m. In order to avoid such low values and to ensure that the source emission does not occur above the ABL, a minimum value of 200 m is imposed to the ABL height before being applied to the pX simulations.

Even though the NWP forecasts are given with an hourly frequency, the pX simulations were performed in this study with a time step of 10 min in order to better capture the temporal variations of the plume. Sensitivity tests showed that the pX simulations with the two Pasquill-based stability diagnoses (Pasquill–Turner and temperature gradient) gave very

similar results with a slightly better performance of the diagnosis of temperature gradient. In the following section, simulations with Pasquill (called pX–Pasquill) standard deviations will thus be computed with the latter stability diagnosis and will be compared with simulations using Doury standard deviations (called pX–Doury).

Finally, the effects of the complex topography (coastline, rocky terrain) and buildings on the plume dispersion may lead to downwash effects that are not explicitly taken into account by the Gaussian puff model. To compensate for this limitation, an effective height that differs from the physical stack height may be used as input. In this case, five values of effective height have been tested: 20, 50, 100, 150, and 200 m, and the most optimum simulations were obtained by using the physical stack height of 100 m.

4.2 Qualitative results and discussion

In this section, we illustrate the behavior of the dispersion simulations at two stations located at short and medium distances from the source. For this purpose, a short time period was selected where a few marked events occurred.

4.2.1 Comparison of ensemble and deterministic dispersion results

Figures 7 and 8 show an example of dispersion results at the PTILH (2 km from the source) and LRC stations (18 km from the source), respectively. There are observed peaks that the deterministic simulation does not reproduce while some ensemble members simulate them with acceptable accuracy. This highlights the potential interest of the ensemble approach compared to the deterministic one. In addition, a visual analysis of the results shows that the pX–Pasquill simulations correctly predict most peaks at the PTILH station (Fig. 7), although with a tendency to underestimate their maximum value. At the same station, pX–Doury simulations

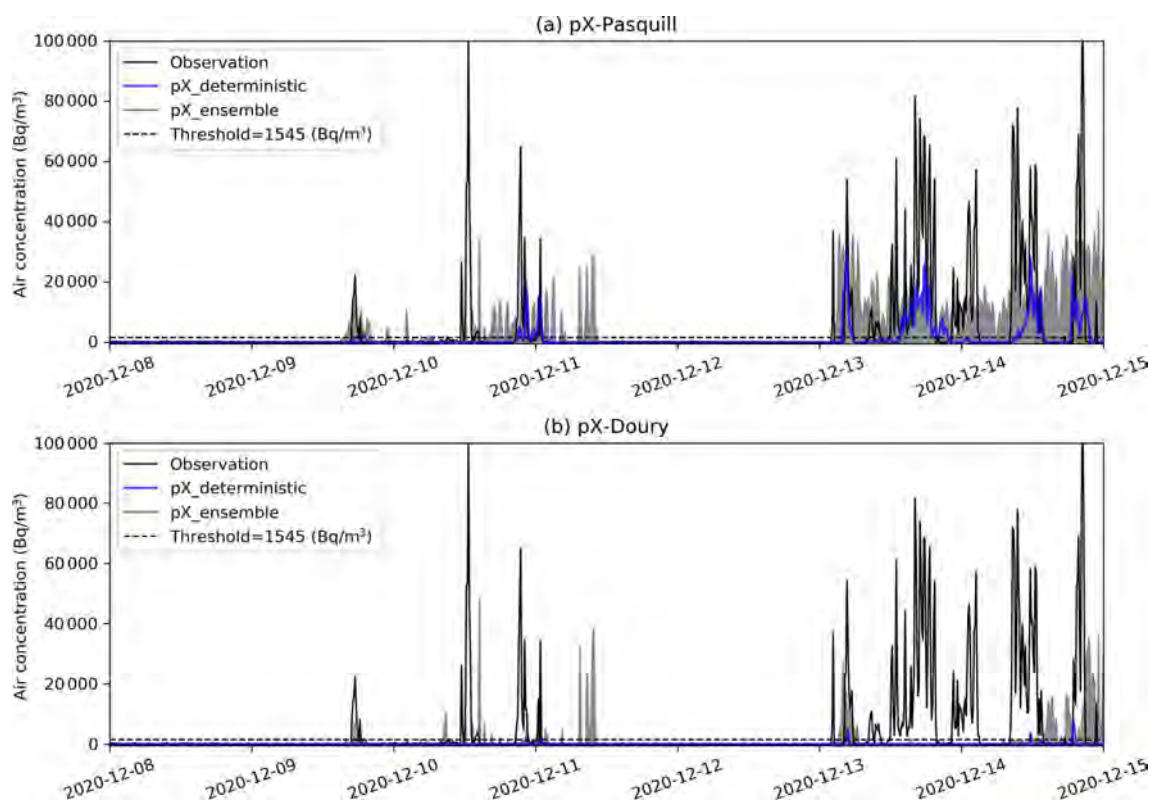


Figure 7. pX–Pasquill (a) and pX–Doury (b) ensemble and deterministic simulations of ^{85}Kr air concentration compared to the observation in the first aggregated period (Table 5), at the PTILH station. The horizontal dashed line shows the air concentration threshold (1545 Bq m^{-3}) above which peaks are considered.

show a strong underestimation of concentrations, resulting in a failure to forecast most observed peaks. As the PTILH station is located only 2 km from the source, the release conditions (initial buoyancy and building downwash effects) largely influence the concentrations at this short distance.

In our simulations, the use of the stack height (100 m) as release height does not allow the accurate prediction of significant ground concentrations at this distance due to approximations made in the Gaussian model that does not include building downwash effects. This is especially the case when using Doury standard deviations, which simulate a very narrow plume on the vertical, resulting in an underestimation of ground concentrations in the case of elevated release. This phenomenon, that characterizes pX–Doury simulations in stable situations, was specifically shown in the case of the La Hague RP (Connan et al., 2014; Korsakissok et al., 2016). At the LRC station (Fig. 8), located farther from the source, this underestimation is much less visible and peaks are better reproduced. There are still, however, peaks that are missed by the deterministic simulations and forecast by some members of the ensemble. This can be explained by the meteorological uncertainties, as detailed in the following section.

4.2.2 Sensitivity to wind and atmospheric stability

In this section, the sensitivity to meteorological variables such as wind and stability is detailed. The aim is to illustrate how small variations in these parameters affect the outputs of atmospheric dispersion simulations. For this purpose, three members of the pX–Pasquill ensemble which have different behaviors are shown. The study is carried out at the LRC station, where both air concentration and wind measurements are available. This station is representative of the model behavior at medium distance, where release conditions are of relatively less importance than meteorological uncertainties. Table 4 summarizes the five observed peaks (with peaks 2, 3, and 4 being much smaller than peaks 1 and 5) from 8 December 2020 to 12 December 2020, when the ensemble behavior is studied.

Although the wind forecasts used to generate the three pX simulations in Fig. 9 are sufficiently close to the observation at the LRC station around the time of peak occurrences (as shown in Fig. 10), some events are reproduced either with small errors in timing (i.e., delay/advance of 2–3 h) or with errors in intensity (i.e., underestimation/overestimation). This can be a result of local effects on the dispersion simulations. In other words, when one is interested in calculating the activity concentration at a point in space, a small

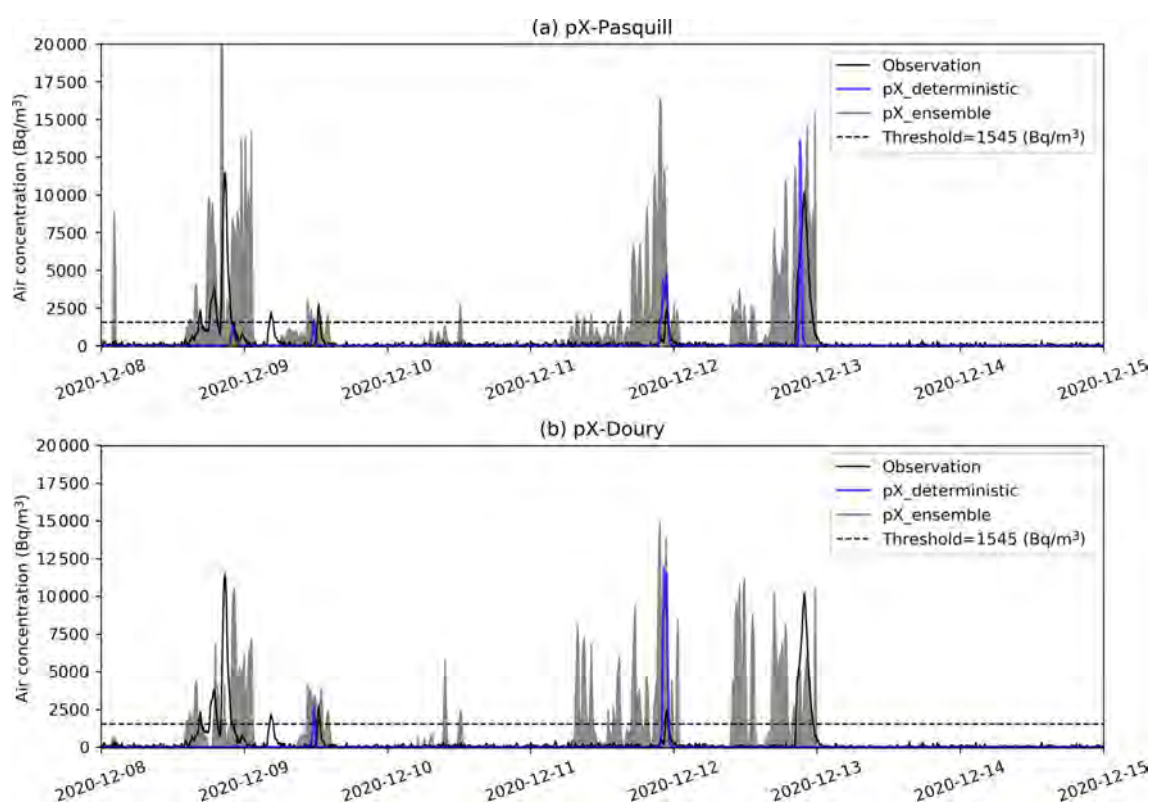


Figure 8. The same as in Fig. 7, but at the LRC station.

Table 4. The five observed peaks of ^{85}Kr at the LRC station (Fig. 9) from 8 to 12 December 2020, and the simulated peaks in the three selected members (in Bq m^{-3}), for pX–Pasquill configuration.

	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5
Date (UTC)	8 Dec 2020 20:45	9 Dec 2020 04:30	9 Dec 2020 12:30	11 Dec 2020 22:50	12 Dec 2020 21:50
Observed activities	11 432	2204	2780	2482	10 145
Member 1 [Timing error]	8000 [+1 h 15 min]	–	–	11 335 [–2 h 00 min]	6000 [+1 h 30 min]
Member 2 [Timing error]	13 795 [+3 h 20 min]	–	–	1714 [+0 h 50 min]	10 945 [–3 h 10 min]
Member 3 [Timing error]	9400 [–2 h 5 min]	–	2900 [–1 h 50 min]	4690 [–1 h 20 min]	10 468 [+0 h 10 min]

error in the wind speed and/or direction can have a significant impact on the estimation of the peaks timing and intensity, due to the sharp concentration gradient. Figure 11 illustrates this issue in the case of peak 3 of member 1 in Fig. 9 and Table 4. This peak underestimates the air concentration because it is located close to the edge of the plume where the concentration gradients are expected to be high.

Figure 9 also shows the effect of the diagnosed stability classes on the dispersion simulations. Almost all the simu-

lated peaks are associated with stable conditions of the atmosphere (4th or 5th Pasquill stability class, corresponding to classes E and F, respectively, in Appendix A1). This may explain the failure of members 1 and 2 to reproduce the observed peak 3 which is associated with neutral stability conditions (3rd stability class, corresponding to class D of Pasquill).

In order to better understand the effect of the stability conditions on the pX simulations, a test was carried out by using

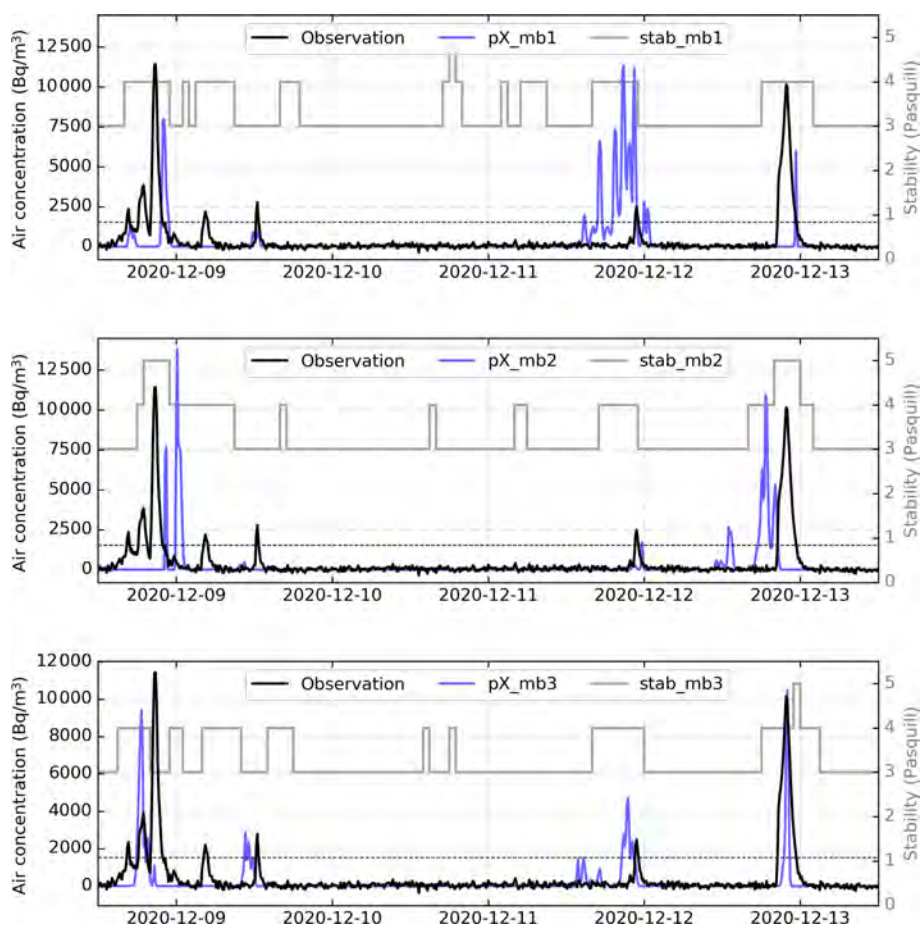


Figure 9. The three selected pX ensemble members (referred to as pX_mb1, pX_mb2, and pX_mb3) of ^{85}Kr activities, at the LRC site, from 8 December 2020 at 12:00 UTC to 13 December 2020 at 12:00 UTC. The gray curves represent the hourly Pasquill stability classes (referred to as stab_mb1, stab_mb2, and stab_mb3) used to generate each of the three pX members. The horizontal dashed line shows the air concentration threshold (1545 Bq m^{-3}) above which peaks are considered.

stationary stability classes in the simulations, each time using one of the three classes obtained by the temperature gradient diagnosis in the period shown in Fig. 9. The result, shown in Fig. 12, confirms that the diagnosed stability classes have a significant effect, mainly on the simulated intensity. It allows an explanation of some model failures, such as the peak 3 for the member 1, but not others. In most cases, the 4th stability class gives the highest ^{85}Kr concentration.

In summary, while some detections/non-detections can be easily explained by examining wind speed and direction time series, other features are less predictable on this sole basis, due to the interaction between the variables and the possible accumulation of small direction errors over the plume trajectory.

4.3 Statistical evaluation of the dispersion ensemble

4.3.1 Evaluation procedures

It is often a desirable feature for a dispersion model to be able to correctly predict a threshold exceedance. It is particularly useful for decision-making purposes, when protective actions for the population are based on the prediction of zones where a given dose threshold could be exceeded. Evaluating the model performance for this kind of purpose is often based on contingency tables (Wilks, 2019) that allow the comparison of the series of observations and simulations by counting four features: (i) true positive (TP) – when a peak is observed and well simulated, (ii) false negative (FN) – when a peak is observed but not simulated, (iii) false positive (FP) – when there is no observed but simulated peak, and (iv) true negative (TN) – when there is no observed and no simulated peak.

The method used by Qu rel et al. (2022) is based on this principle and used to evaluate a series of peaks from deter-

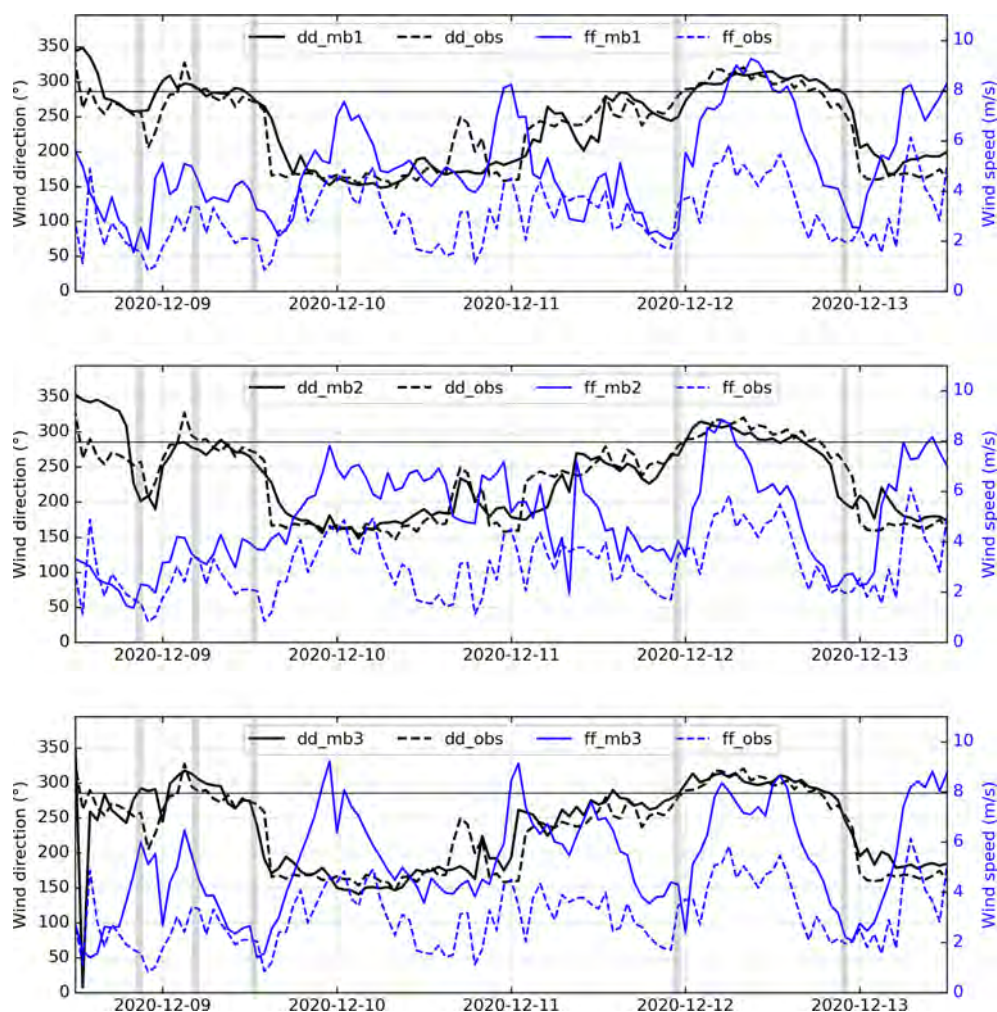


Figure 10. The three wind forecasts from AROME-EPS (solid curves) used to generate the pX simulations presented in Fig. 9, compared to wind observations stored at LRC (dashed curves); ff and dd denote, respectively, wind speed and direction, while mb1, mb2, and mb3 denote each of the three AROME-EPS members. The vertical gray lines show the occurrence time of the five peaks presented in Table 4. The horizontal line shows the angle of the LRC station with respect to the source (286°), which corresponds to the wind direction that transports the plume from the source to LRC.



Figure 11. Simulation of the dispersion of the ^{85}Kr exceeding 1545 Bq m^{-3} in the case of member 1 presented in Fig. 9 and Table 4, surrounding the moment of the observed peak 3 at the LRC station.

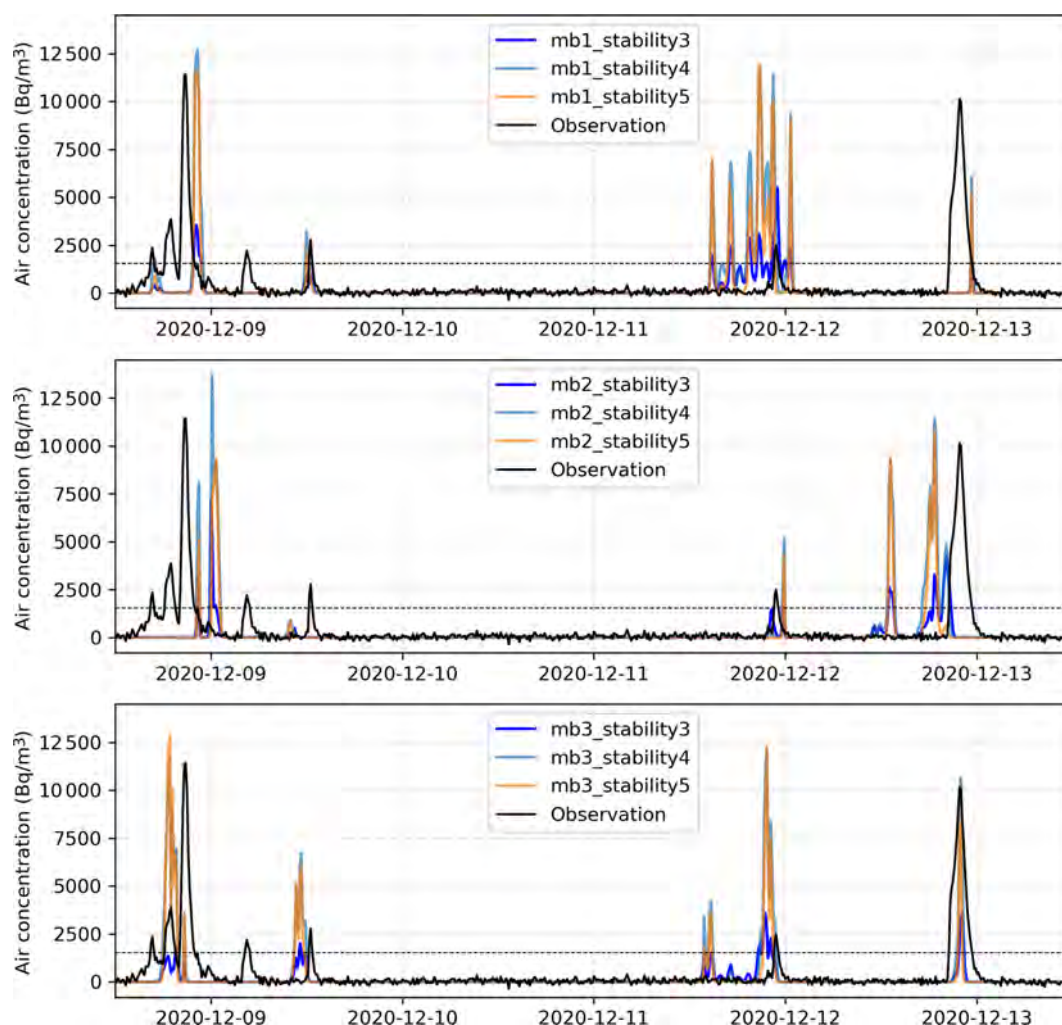


Figure 12. The same experiments as in Fig. 9, but with three stationary stability classes of Pasquill: 3rd, 4th, and 5th class; mb1, mb2, and mb3 denote, respectively, each of the three members of pX ensemble simulations.

ministic simulation against observations. This method consists of evaluating the success/failure of the model for each observed or simulated peak, including a defined temporal tolerance. However, in the case of an ensemble, the same procedure cannot apply because there are multiple simulations and so unobserved events cannot be well-defined. In addition, it often occurs that the FPs from different members constitute a series that exceeds the correlation timescale between peaks (i.e., the temporal offset between two peaks at which they no longer correspond to the same event). Hence, one cannot decide whether all these TPs correspond to the same event or several. To deal with this problem, the method used in this work comprises the discretization of the time series by sliding intervals of length Δt and moving time τ (Fig. 13). For the k th discretization step, the evaluation interval is $(t', t' + \Delta t)$, such that

$$t' = t_0 + (k - 1)\tau, \quad (7)$$

where t_0 is the initial time of the time series.

Then, the maximum values from each ensemble simulation are compared to the maximum observed value in each discretization interval. Thus, considering a threshold of 1545 Bq m^{-3} (corresponding to the detection threshold for air concentration of ^{85}Kr) and a given decision threshold x (i.e., the number of members at which the success/failure of the ensemble is considered), the four features of the contingency tables are defined in this case as follows:

- TP: when a peak is observed and well simulated by at least x members,
- FN: when a peak is observed but simulated by a number of members less than x ,
- FP: when there is no observed peak but simulated by at least x members,

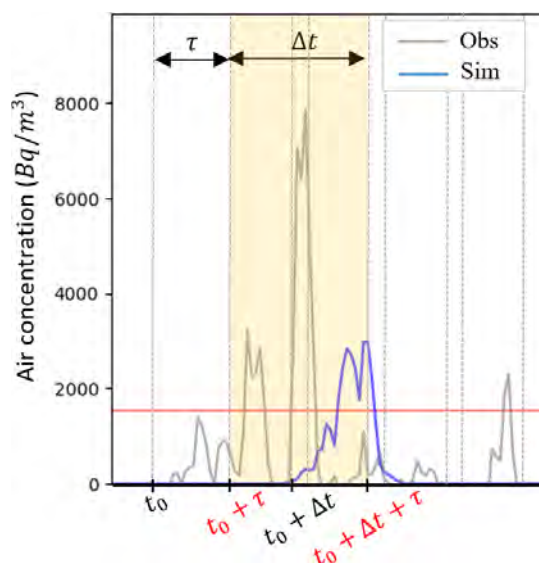


Figure 13. Illustration of the temporal discretization method by sliding intervals used in this study. This figure shows the case of the second time interval of length Δt : ($t_0 + \tau$, $t_0 + \Delta t + \tau$).

- TN: when there is no observed peak but simulated by a number of members less than x .

This method also allows a decrease in the number of TN without having a statistically significant impact on the scores thanks to the normalization in the contingency tables. This advantage gives the possibility of using scores that integrate the number of TN, contrary to the classical method which is not adapted to the case of rare events (i.e., the case of non-continuous events in time).

Then, the performance of the ensemble is measured using hit rate (H) and false alarm rate (F) metrics (Quérel et al., 2022; Wilks, 2019). The hit rate (also called recall) is the fraction of the observed events that are successfully reproduced (Eq. 8). The false alarm rate is the fraction of the simulated peaks that are not observed (Eq. 9).

$$H = \frac{TP}{TP + FN}, \quad (8)$$

$$F = \frac{FP}{FP + TN}. \quad (9)$$

To choose the most representative combination (Δt , τ), we consider that two events are independent if they are more than 3 h apart. Thus, six combinations (Δt , τ) are tested by the statistical scores below: ($\Delta t = 1 h$, $\tau = 1 h$), ($\Delta t = 2 h$, $\tau = 1 h$), ($\Delta t = 2 h$, $\tau = 2 h$), ($\Delta t = 3 h$, $\tau = 1 h$), ($\Delta t = 3 h$, $\tau = 2 h$), and ($\Delta t = 3 h$, $\tau = 3 h$).

In the case of the AROME-EPS-pX ensemble, there are 16 possible decision thresholds ($x = 1, 2, \dots, 16$). In order to identify the most optimal ones, the ROC (relative operating characteristic) curves are commonly used as a graphical summary of the decision-making skill of an ensemble, by connecting all points $[F(x), H(x)]$ for each decision threshold x

(Swets, 1973; Wilks, 2019; Raynaud and Bouttier, 2016). In addition, to better capture the internal variation of the performance of the model according to the decision thresholds, the Peirce skill score (PSS) (Peirce, 1884; Wilks, 2019) was calculated for each x , as follows:

$$PSS(x) = H(x) - F(x) = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{(TP + FN) \times (FP + TN)}. \quad (10)$$

Note that the $PSS(x)$ corresponds to the vertical distance between the point $[F(x), H(x)]$ of the ROC curve and the no-skill line (i.e., the bisector line, $H = F$). This means that the threshold that presents a better compromise between the probability of detection and the probability of false detection of events corresponds to the one that maximizes the PSS (the closest point to $[F = 0, H = 1]$ in the ROC) (Manzato, 2005, 2007).

Finally, the verification process was performed by aggregating the measurements and simulations of all stations in three periods where a high density of events was recorded (Table 5). This gives a total number of observed threshold exceedance events of 408 over 30 d which is sufficient for the metrics to be statistically robust.

4.3.2 Statistical results

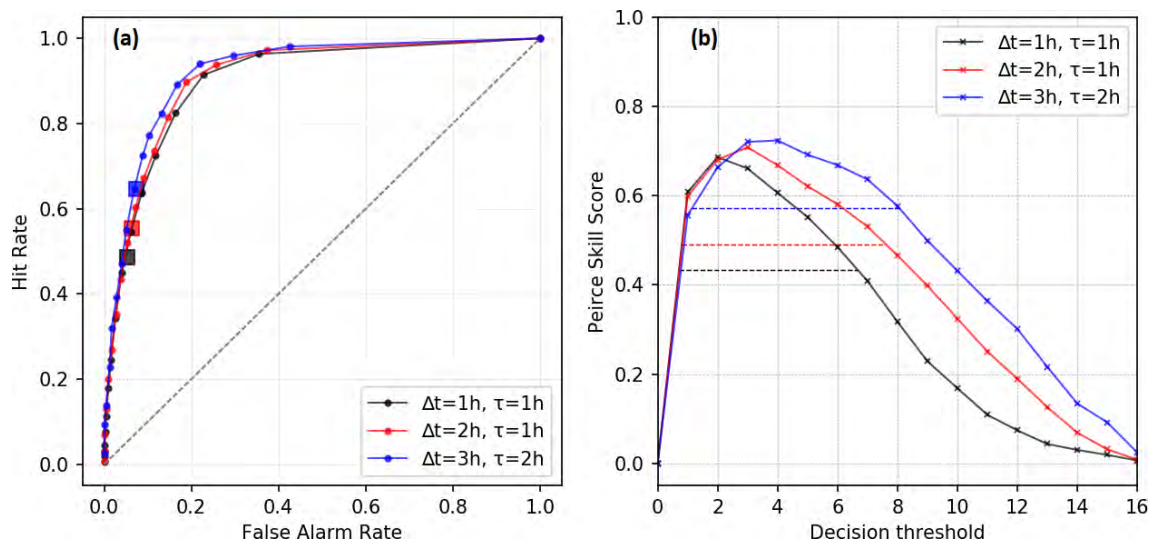
Simulations and observations at all stations were aggregated in order to investigate the probabilistic performance of the ensembles, using ROC curves and PSS. Figure 14 shows the results for three combinations (Δt , τ) (the three other cases that were not shown are similar to ($\Delta t = 1 h$, $\tau = 1 h$), and ($\Delta t = 2 h$, $\tau = 1 h$)). For the deterministic simulations, all the discretization configurations give almost the same false alarm rate (around 6%) but with large differences for hit rates, with a difference of about 20% between the best and the worst configuration. The best scores were obtained with the discretization parameters ($\Delta t = 3 h$, $\tau = 2 h$) for both pX–Doury and pX–Pasquill simulations. This configuration also gave the closest results to the scores obtained with the method of Quérel et al. (2022) for the deterministic simulation (not shown here). In the following discussion, only the results with the Pasquill standard deviations will be shown.

The pX–Pasquill ensembles have a maximum value of PSS ($PSS_{\max} = 0.72$) corresponding to an optimal decision threshold of three and four members. The ensemble performs better than the deterministic simulation in a range of seven decision thresholds, which represents almost 50% of the possible values of the decision thresholds. In addition, the ensemble simulations allow the optimization of the decision threshold (Richardson, 2001). These results highlight the robustness of the probabilistic simulations compared to the deterministic simulation in the process of the prediction of threshold exceedances.

To go further into the analysis of the probabilistic performance of the ensembles, the effect of the distance from the source is investigated in Fig. 15. The most repre-

Table 5. Aggregated time periods for calculating the probabilistic scores of evaluation of pX ensemble and deterministic simulations.

Aggregated periods	8 to 15 Dec 2020	26 to 30 Dec 2020	7 to 26 Jan 2021	Total
Observed peaks	116	92	200	408 peaks/30 d

**Figure 14.** ROC curves (a) and the PSS as a function of decision thresholds (b) of the pX ensemble simulations performed with Pasquill stability classes by aggregating simulations and observations at all stations. There is one curve for each $(\Delta t, \tau)$: $(\Delta t = 1h, \tau = 1h)$, $(\Delta t = 2h, \tau = 1h)$, $(\Delta t = 3h, \tau = 2h)$. The values of the scores for the deterministic pX simulation are indicated by squares in the ROC curves and by horizontal dashed lines in the PSS curves. The diagonal dashed lines are the no-skill lines ($H = F$).

sentative discretization parameters ($\Delta t = 3h, \tau = 2h$) were used to generate dispersion simulations by aggregating data for two groups of stations. The first is a -10 km group which contains stations at distances less than 10 km: PTLIH (2 km), Digulleville (2.6 km), Beaumont (4.2 km), and Gréville (5.2 km). The second is a $+10$ km group which contains stations beyond 10 km: Urville (10.4 km), Ludiver (12.7 km), Octeville (17.7 km), and LRC (18 km).

The model performs better in the near-field stations. In this case, the ensemble is more efficient than the deterministic simulation in 50 % (8 members) of the decision thresholds, against 37.5 % (6 members) for stations located beyond 10 km. In both cases, the optimal threshold is three members. This better performance in the near-field area may be related to the accumulation of small errors along the plume trajectory that could make the far-range forecast of the peaks more accurate. In addition, peaks at distances farther than 10 km are closest to the background noise, and some errors in the detection of the peaks may be linked to the difficulty in discriminating a peak from the background noise.

With the diffusion laws of Doury (not shown here), the best scores are obtained also for the group of nearest stations to the source in the case of deterministic simulation. However, for the ensembles, there is no significant dependency of

the probabilistic scores with respect to the distance from the source.

Taking both meteorological and model uncertainties into account would imply generating an ensemble by also perturbing model parameters (Pasquill/Doury, source elevation, stability). In this perspective, a 32-member super ensemble was generated by combining pX–Pasquill and pX–Doury ensembles. The result (not shown here) is very similar to the pX–Pasquill ensemble, without any notable added value.

5 Conclusions and perspectives

In this study, we explored the potential value of using fine-scale spatial and temporal meteorological ensembles to represent the inherent meteorological uncertainties in ADM outputs. To do so, the high-resolution operational forecasts, AROME-EPS of Météo-France, have been coupled to the Gaussian puff short-range dispersion model, pX of IRSN, to generate a 16-member dispersion ensemble, which accounts for meteorological uncertainties. This paper also proposes an original method to evaluate the ability of a dispersion ensemble to forecast threshold exceedances, using probabilistic scores. For this purpose, we used an original dataset of continuous ^{85}Kr air concentration measurements (DISKRYNOC campaign recently conducted by IRSN),

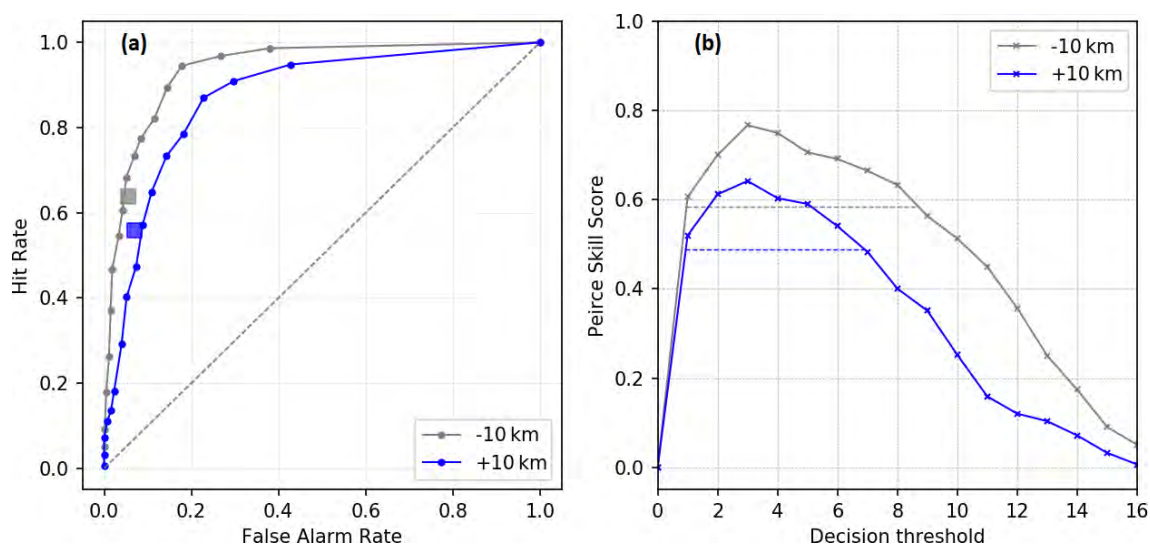


Figure 15. ROC curves (a) and the PSS as a function of decision thresholds (b) of the pX ensemble simulations performed with Pasquill stability classes by aggregating data in the two groups of stations: -10 km (Beaumont, Digulleville, Gréville, and PTLIH) and $+10$ km (LRC, Ludiver, Octeville, and Urville). There is one curve for each group of stations. The scores are calculated using the most optimal discretization configuration ($\Delta t = 3$ h, $\tau = 2$ h).

along with a well-known source term (every 10 min, provided by the Orano La Hague RP) and meteorological data (NWP from Météo-France and continuous observations from Météo-France/IRSN).

As a first step, the assessment of the quality of the AROME-EPS forecasts, in the North-Cotentin peninsula (northwestern France), was carried out, using meteorological observations over the two-month period of interest (December 2020–January 2021). Wind speed and direction are the most influential variables on the transport of a plume through the atmosphere. For this reason, the meteorological ensembles were evaluated in terms of these 2 meteorological variables in 25 vertical levels within the ABL. The results of this evaluation showed that the AROME-EPS ensembles represent the wind in the ABL with a very acceptable accuracy, despite the slight systematic errors present in the lower layers. Then, an ensemble dispersion modeling chain was implemented using the AROME-EPS forecasts as inputs to the pX model. At this stage, it was necessary to set up a way to combine several 45 h forecasts from different initialization times, and that could be used in the early phase of a nuclear accident. The method proposed in this paper is to use the newest forecast available at the beginning of a day (at 00:00 UTC). This approach can be used to span long periods, in the case of an emergency, by juxtaposing 24 h successive forecasts. Then, two configurations of dispersion simulations were run, with Pasquill and Doury Gaussian standard deviations. A qualitative assessment of the simulations was first presented, to illustrate the ability of some members of the ensemble to forecast peaks while the deterministic simulations failed. The sensitivity of the results to atmospheric stability

diagnosis was also highlighted. The probabilistic consistency of the resulting dispersion ensembles was then compared using an innovative method of temporal discretization by sliding intervals, and by calculating two probabilistic scores: ROC curves and PSS. This evaluation process was performed in two parts. First, by comparing the overall performance of the ensemble by aggregating the data from all the measurement stations. Secondly, by comparing the performance of the two configurations in the near fields (stations located less than 10 km from the source) and far fields (stations beyond 10 km from the source). In all cases studied, the best decision threshold was found to be three members, and the ensembles performed better than the deterministic simulations. For operational purposes during emergency situations, this result would imply that when three or more members of the ensemble forecast a threshold exceedance, protective actions should be recommended.

One of the limitations of this study is that it evaluates the performance of the dispersion ensembles by only considering its ability to forecast a value above a given threshold, with a temporal tolerance between the simulated and observed peaks. To complete this evaluation, it would be interesting to develop complementary indicators that evaluate the consistency of dispersion ensembles in term of intensity between the simulated and observed peaks. In addition, since ^{85}Kr is a noble gas, this work does not investigate the deposition of radionuclides on the ground, a parameter that would be sensitive to uncertainties in rain forecasts. Thus, it will be interesting to apply the approaches developed in this study to the case of another atmospheric tracer that is not an inert gas, such as radon-222 (Quérel et al., 2022).

Appendix A: Atmospheric stability by classes

A1 Stability classes of Doury (Doury, 1976)

This diagnosis consists in the discretization of the atmospheric stability in two classes: normal diffusion (ND) and low diffusion (LD). While ND corresponds to unstable and neutral situations, LD corresponds to stable situations. In addition, this method is based only on the vertical temperature gradient, which means that it does not take into account the turbulence of mechanical origin:

$$\frac{\partial T}{\partial z} \begin{cases} \leq -0.5(^{\circ}\text{C}/100\text{m}) & : \text{ND}, \\ > -0.5(^{\circ}\text{C}/100\text{m}) & : \text{LD}. \end{cases} \quad (\text{A1})$$

A2 Stability classes of Pasquill (Pasquill, 1961)

The Pasquill classes allow the discretization of the atmospheric stability in six classes from *A* (very unstable, coded by 0) to *F* (very stable, coded by 5). In this article, we have used two diagnostics of calculating of the Pasquill classes:

- *Method of Turner* (Turner, 1969). Based on the 10 m wind speed and the surface solar radiation downwards (during daytime) or total cloud cover (at night) (Table A1), this diagnostic has the advantage of taking into account the two origins of turbulence: mechanical (wind) and thermal (solar radiation).
- *Method of temperature gradient* (Seinfeld and Pandis, 1998). Based on the temperature difference over 100 m (Table A2), this diagnosis does not take into account the turbulence of mechanical origin, but it captures variations in stability conditions better than the Doury diagnosis.

Table A1. Pasquill classes according to the method of Turner.

10 m wind speed (m s ⁻¹)	Day Surface solar radiation downwards w m ⁻²			Night Total cloud cover (%)	
	Strong [700, +∞[Moderate [350, 700[Low [0, 350[[4/8, 7/8]	[0, 3/8]
<2	A	A–B	B	F	F
3	A–B	B	C	E	F
3–5	B	B–C	C	D	E
5–6	C	C–D	D	D	D
>6	C	D	D	D	D

Appendix B: Formulas for Gaussian standard deviations

The aim is to calculate the evolution of standard deviations of the concentration distribution which is given by

$$\sigma(t + dt) = \sigma(t) + \frac{d\sigma}{dt} dt = \sigma(t) + \frac{d\sigma}{dx} U dt, \quad (\text{B1})$$

Table A2. Pasquill classes according to method of temperature gradient, and correspondence with the classes of Doury.

Atmospheric stability	Stability classes of Pasquill	$\partial T/\partial z$	Stability classes of Doury
Unstable	A	$] -\infty, -1.9[$	Normal
	B	$[-1.9, -1.7[$	diffusion
	C	$[-1.7, -1.5[$	(ND)
Neutral	D	$[-1.5, -0.5[$	ND
Stable	E	$[-0.5, 1.5[$	Low
	F	$[1.5, +\infty[$	diffusion (LD)

where t and x are time and distance since the emission of the puff, respectively; U is the speed of advection of the puff.

Thus, the problem is deferred to the determination of $\frac{d\sigma}{dx}$ (or $\frac{d\sigma}{dt}$) in each time step t . For a given standard deviation law, we have $\sigma(x) = f(x, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$, where α_i are parameters that depend on the atmospheric stability, and are determined empirically. Then, $\frac{d\sigma}{dx}$ can be expressed as follows:

$$\begin{cases} \frac{d\sigma}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x}(x, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \\ x = f^{-1}(\sigma) \end{cases} \Leftrightarrow \frac{d\sigma}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x}(f^{-1}(\sigma), \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n). \quad (\text{B2})$$

A similar reasoning is possible for $\frac{d\sigma}{dt}$. Depending on the complexity of the function f , it will be more or less easy to express the function $\frac{d\sigma}{dx}$.

- *Pasquill laws.*

$$\sigma = ax^b + c \Rightarrow \frac{d\sigma}{dx} = ab \left(\frac{\sigma}{a} \right)^{\frac{b-1}{b}}, \quad (\text{B3})$$

where the parameters a , b , and c are determined according to the Pasquill stability classes.

- *Doury laws.*

$$\sigma = At^k t^{k-1} \Rightarrow \frac{d\sigma}{dx} = kA\sigma^{\frac{k-1}{k}}, \quad (\text{B4})$$

where the parameters A and k are determined according to the Doury stability classes and depend on transfer time since release time.

Code and data availability. The Arome and Arome-EPS data can be accessed on the official Météo-France open data portal: <https://donneespubliques.meteofrance.fr/>, last access: 15 December 2022. IRSN data (radiological and meteorological) are available on demand. To get the statistical calculation code and the plotting code please contact the corresponding author.

Author contributions. The project was conceptualized and supervised by MP and IK. Formal analysis and development of the calculation codes were carried out by YEO. The radiological measurement campaign was conducted by OC. All the authors contributed to the discussion of the results and to writing the article.

Competing interests. The contact author has declared that none of the authors has any competing interests.

Disclaimer. Publisher's note: Copernicus Publications remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Acknowledgements. The authors thank Orano RP for providing source term and environmental measurement data (^{85}Kr and meteorological measurements). The authors thank Emmanuel Quentric for his review, and Arnaud Quérel and Pierrick Cébron for discussions and suggestions on the use of statistical indicators.

Review statement. This paper was edited by Stefano Galmarini and reviewed by two anonymous referees.

References

- Aliyu, A. S., Evangelidou, N., Mousseau, T. A., Wu, J., and Ramli, A. T.: An overview of current knowledge concerning the health and environmental consequences of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant (FDNPP) accident, *Environ. Int.*, 85, 213–228, <https://doi.org/10.1016/j.envint.2015.09.020>, 2015.
- Bollhöfer, A., Schlosser, C., Schmid, S., Konrad, M., Purtschert, R., and Kraus, R.: Half a century of Krypton-85 activity concentration measured in air over Central Europe: Trends and relevance for dating young groundwater, *J. Environ. Radioactiv.*, 205, 7–16, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2019.04.014>, 2019.
- Bouttier, F. and Raynaud, L.: Clustering and selection of boundary conditions for limited-area ensemble prediction, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 144, 2381–2391, <https://doi.org/10.1002/qj.3304>, 2018.
- Bouttier, F., Vié, B., Nuissier, O., and Raynaud, L.: Impact of stochastic physics in a convection-permitting ensemble, *Mon. Weather Rev.*, 140, 3706–3721, <https://doi.org/10.1175/MWR-D-12-00031.1>, 2012.
- Bouttier, F., Raynaud, L., Nuissier, O., and Ménétrier, B.: Sensitivity of the AROME ensemble to initial and surface perturbations during HyMeX, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 142, 390–403, <https://doi.org/10.1002/qj.2622>, 2016.
- Brousseau, P., Berre, L., Bouttier, F., and Desroziers, G.: Background-error covariances for a convective-scale data-assimilation system: AROME–France 3D-Var, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 137, 409–422, <https://doi.org/10.1002/qj.750>, 2011.
- Charrois, L., Cosme, E., Dumont, M., Lafaysse, M., Morin, S., Libois, Q., and Picard, G.: On the assimilation of optical reflectances and snow depth observations into a detailed snowpack model, *The Cryosphere*, 10, 1021–1038, <https://doi.org/10.5194/tc-10-1021-2016>, 2016.
- Connan, O., Smith, K., Organo, C., Solier, L., Maro, D., and Hébert, D.: Comparison of RIMPUFF, HYSPLIT, ADMS atmospheric dispersion model outputs, using emergency response procedures, with ^{85}Kr measurements made in the vicinity of nuclear reprocessing plant, *J. Environ. Radioactiv.*, 124, 266–277, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2013.06.004>, 2013.
- Connan, O., Solier, L., Hébert, D., Maro, D., Lamotte, M., Voiseux, C., Laguionie, P., Cazimajou, O., Le Cavelier, S., Godinot, C., Morillon, M., Thomas, L., and Percot, S.: Near-field krypton-85 measurements in stable meteorological conditions around the AREVA NC La Hague reprocessing plant: estimation of atmospheric transfer coefficients, *J. Environ. Radioactiv.*, 137, 142–149, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2014.07.012>, 2014.
- Courtier, P., Freyrier, C., Geleyn, J.-F., Rabier, F., and Rochas, M.: The Arpege project at Meteo France, in: Seminar on Numerical Methods in Atmospheric Models, 9–13 September 1991, Vol. II, 193–232, ECMWF, ECMWF, Shinfield Park, Reading, <https://www.ecmwf.int/sites/default/files/elibrary/1991/8798-arpege-project-meteo-france.pdf> (last access: 14 December 2022), 1991.
- De Meutter, P. and Delcloo, A.: Uncertainty quantification of atmospheric transport and dispersion modelling using ensembles for CTBT verification applications, *J. Environ. Radioactiv.*, 250, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106918>, 2022.
- De Meutter, P., Camps, J., Delcloo, A., Deconninck, B., and Termonia, P.: On the capability to model the background and its uncertainty of CTBT-relevant radionuclide isotopes in Europe by using ensemble dispersion modeling, *J. Environ. Radioactiv.*, 164, 280–290, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2016.07.033>, 2016.
- Descamps, L., Labadie, C., Joly, A., Bazile, E., Arbogast, P., and Cébron, P.: PEARP, the Météo-France short-range ensemble prediction system, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 141, 1671–1685, <https://doi.org/10.1002/qj.2469>, 2015.
- Doury, A.: Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère, Tech. Rep. CEA-R-4270, CEA, <https://www.ipen.br/biblioteca/rel/R30997.pdf> (last access: 14 December 2022), 1976.
- Draxler, R., Arnold, D., Chino, M., Galmarini, S., Hort, M., Jones, A., Leadbetter, S., Malo, A., Maurer, C., Rolph, G., Saito, K., Servranckx, R., Shimbori, T., Solazzo, E., and Wotawa, G.: World Meteorological Organization's model simulations of the radionuclide dispersion and deposition from the Fukushima Daiichi nuclear power plant accident, *J. Environ. Radioactiv.*, 139, 172–184, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2013.09.014>, 2015.
- Fortin, V., Abaza, M., Ancil, F., and Turcotte, R.: Why should ensemble spread match the RMSE of the ensemble mean?, *J. Hydrometeorol.*, 15, 1708–1713, <https://doi.org/10.1175/JHM-D-14-0008.1>, 2014.
- Galmarini, S., Bianconi, R., Addis, R., Andronopoulos, S., Astrup, P., Bartzis, J., Bellasio, R., Buckley, R., Champion, H., Chino, M., R., D., Davakis, E., Eleveld, H., Glaab, H., Manning, A., Mikkelsen, T., Pechinger, U., Polreich, E., Prodanova, M., Slaper, H., Syrakov, D., Terada, H., Der Auwera, L., Valkama, I., and Zelazny, R.: Ensemble dispersion forecasting – Part II: application and evaluation, *Atmos. Environ.*, 38, 4619–4632, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.05.031>, 2004a.

- Galmarini, S., Bianconi, R., Klug, W., Mikkelsen, T., Addis, R., Andronopoulos, S., Astrup, P., Baklanov, A., Bartniki, J., Bartzis, J., Bellasio, R., Bompay, F., Buckley, R., Bouzom, M., Champion, H., R., D., Davakis, E., Eleveld, H., Geertsema, G., Glaab, H., Kollax, M., Ilvonen, M., Manning, A., Pechinger, U., Persson, C., Polreich, E., Potemski, S., Prodanova, M., Saltbones, J., Slaper, H., Sofiev, M., Syrakov, D., Sørensen, J., Der Auwera, L., Valkama, I., and Zelazny, R.: Ensemble dispersion forecasting – Part I: concept, approach and indicators, *Atmos. Environ.*, 38, 4607–4617, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2004.05.030>, 2004b.
- Girard, S., Korsakissok, I., and Mallet, V.: Screening sensitivity analysis of a radionuclides atmospheric dispersion model applied to the Fukushima disaster, *Atmos. Environ.*, 95, 490–500, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.07.010>, 2014.
- Girard, S., Mallet, V., Korsakissok, I., and Mathieu, A.: Emulation and Sobol’ sensitivity analysis of an atmospheric dispersion model applied to the Fukushima nuclear accident, *J. Geophys. Res.-Atmos.*, 121, 3484–3496, <https://doi.org/10.1002/2015JD023993>, 2016.
- Girard, S., Armand, P., Duchenne, C., and Yalamas, T.: Stochastic perturbations and dimension reduction for modelling uncertainty of atmospheric dispersion simulations, *Atmos. Environ.*, 224, 117313, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.117313>, 2020.
- Gurriaran, R., Maro, D., and Solier, L.: Etude de la dispersion atmosphérique en champ proche en cas de rejet en hauteur-étalonnage des appareils de mesure nucléaires, IPSN/Département de protection de l’environnement, Tech. Rep., Rapport DPRE/SERNAT/2001-08, <http://www.irsn.fr/EN/Contact> (last access: 15 December 2022), 2001.
- Gurriaran, R., Maro, D., Bouisset, P., Hebert, D., Leclerc, G., Mekhlouche, D., Rozet, M., and Solier, L.: In situ metrology of ⁸⁵Kr plumes released by the COGEMA La Hague nuclear reprocessing plant, *J. Environ. Radioactiv.*, 72, 137–144, [https://doi.org/10.1016/S0265-931X\(03\)00195-4](https://doi.org/10.1016/S0265-931X(03)00195-4), 2004.
- Kajino, M., Sekiyama, T. T., Igarashi, Y., Katata, G., Sawada, M., Adachi, K., Zaizen, Y., Tsuruta, H., and Nakajima, T.: Deposition and dispersion of radio-cesium released due to the Fukushima nuclear accident: Sensitivity to meteorological models and physical modules, *J. Geophys. Res.-Atmos.*, 124, 1823–1845, <https://doi.org/10.1029/2018JD028998>, 2019.
- Korsakissok, I., Mathieu, A., and Didier, D.: Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the Fukushima Nuclear Power Plant accident: A local-scale simulation and sensitivity study, *Atmos. Environ.*, 70, 267–279, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.01.002>, 2013.
- Korsakissok, I., Contu, M., Connan, O., Mathieu, A., and Didier, D.: Validation of the Gaussian puff model pX using near-field krypton-85 measurements around the AREVA NC La Hague reprocessing plant: comparison of dispersion schemes, in: 17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Budapest, https://www.harmo.org/Conferences/Proceedings/_Budapest/publishedSections/H17-095.pdf (last access: 15 December 2022), 2016.
- Korsakissok, I., Périllat, R., Andronopoulos, S., Bedwell, P., Berge, E., Charnock, T., Geertsema, G., Gering, F., Hamburger, T., Klein, H., Leadbetter, S., Lind, O. C., Pazmandi, T., Rudas, C., Salbu, B., Sogachev, A., Syed, N., Rhomas, J. M., Ulimoe, M., De Vries, H., and Wellings, J.: Uncertainty propagation in atmospheric dispersion models for radiological emergencies in the pre-and early release phase: summary of case studies, *Radioprotection*, 55, S57–S68, <https://doi.org/10.1051/radiopro/2020013>, 2020.
- Le, N. B. T., Korsakissok, I., Mallet, V., Périllat, R., and Mathieu, A.: Uncertainty study on atmospheric dispersion simulations using meteorological ensembles with a Monte Carlo approach, applied to the Fukushima nuclear accident, *Atmos. Environ.*, 10, 100112, <https://doi.org/10.1016/j.aeaoa.2021.100112>, 2021.
- Leadbetter, S., Andronopoulos, S., Bedwell, P., Chevalier-Jabet, K., Geertsema, G., Gering, F., Hamburger, T., Jones, A., Klein, H., Korsakissok, I., Matthieu, A., Pazmandi, T., Périllat, R., Rudas, C., Sogachev, A., Szanto, P., Thomas, J. M., Twenhofel, C., De Vries, H., and Wellings, J.: Ranking uncertainties in atmospheric dispersion modelling following the accidental release of radioactive material, *Radioprotection*, 55, S51–S55, <https://doi.org/10.1051/radiopro/2020012>, 2020.
- Leadbetter, S. J., Hort, M. C., Jones, A. R., Webster, H. N., and Draxler, R. R.: Sensitivity of the modelled deposition of Caesium-137 from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant to the wet deposition parameterisation in NAME, *J. Environ. Radioactiv.*, 139, 200–211, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2014.03.018>, 2015.
- Leadbetter, S. J., Jones, A. R., and Hort, M. C.: Assessing the value meteorological ensembles add to dispersion modelling using hypothetical releases, *Atmos. Chem. Phys.*, 22, 577–596, <https://doi.org/10.5194/acp-22-577-2022>, 2022.
- Leroy, C., Maro, D., Hébert, D., Solier, L., Rozet, M., Le Cavalier, S., and Connan, O.: A study of the atmospheric dispersion of a high release of krypton-85 above a complex coastal terrain, comparison with the predictions of Gaussian models (Briggs, Doury, ADMS4), *J. Environ. Radioactiv.*, 101, 937–944, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.06.011>, 2010.
- Leutbecher, M. and Lang, S.: On the reliability of ensemble variance in subspaces defined by singular vectors, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 140, 1453–1466, 2014.
- Mallet, V. and Sportisse, B.: Air quality modeling: From deterministic to stochastic approaches, *Comput. Math. Appl.*, 55, 2329–2337, <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2007.11.004>, 2008.
- Manzato, A.: An odds ratio parameterization for ROC diagram and skill score indices, *Weather Forecast.*, 20, 918–930, <https://doi.org/10.1175/WAF899.1>, 2005.
- Manzato, A.: A note on the maximum Peirce skill score, *Weather Forecast.*, 22, 1148–1154, <https://doi.org/10.1175/WAF1041.1>, 2007.
- Maro, D., Crabol, B., Germain, P., Baron, Y., Hebert, D., and Bouisset, P.: A study of the near field atmospheric dispersion of emissions at height: comparison of Gaussian plume models (Doury, Pasquill-Briggs, Caire) with krypton 85 measurements taken around La Hague nuclear reprocessing plant, *Radioprotection*, 37, 1277–1282, 2002.
- Maro, D., Chechiak, B., Tenailleau, L., Germain, P., Hebert, D., and Solier, L.: Analysis of experimental campaigns on atmospheric transfers around the AREVA NC spent nuclear fuel reprocessing plant at La Hague: comparison between operational models and measurements, in: 11th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Cambridge, <https://www.harmo.org/Conferences/>

- Proceedings/_Cambridge/publishedSections/Pp003-007.pdf (last access: 15 December 2022), 2007.
- Mathieu, A., Korsakissok, I., Quélo, D., Groëll, J., Tombette, M., Didier, D., Quentric, E., Saunier, O., Benoit, J.-P., and Isnard, O.: Atmospheric dispersion and deposition of radionuclides from the Fukushima Daiichi nuclear power plant accident, *Elements*, 3, 195–200, <https://doi.org/10.2113/gselements.8.3.195>, 2012.
- Nie, B., Fang, S., Jiang, M., Wang, L., Ni, M., Zheng, J., Yang, Z., and Li, F.: Anthropogenic tritium: Inventory, discharge, environmental behavior and health effects, *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 135, 110188, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110188>, 2021.
- Olesen, H.: Model Validation Kit – Status and Outlook, in: 5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Rhodes, Interscience Publishers, <https://doi.org/10.1504/IJEP.2000.000527>, 1998.
- Orano, H.: Rapport d’information du site Orano La Hague, Tech. Rep., Orano, La Hague, https://www.orano.group/docs/default-source/orano-doc/groupe/publications-reference/tsn-la-hague-2021.pdf?sfvrsn=7865d99c_8 (last access: 14 December 2022), 2021.
- Palmer, T. N., Buizza, R., Doblas-Reyes, F., Jung, T., Leutbecher, M., Shutts, G. J., Steinheimer, M., and Weisheimer, A.: Stochastic parametrization and model uncertainty, Tech. Rep. 598, ECMWF Reading, UK, https://www2.physics.ox.ac.uk/sites/default/files/2011-08-15/techmemo598_stochphys_2009_pdf_50419.pdf (last access: 15 December 2022), 2009.
- Pasquill, F.: The estimation of the dispersion of windborne material, *Met. Mag.*, 90, 33 pp., 1961.
- Peirce, C. S.: The numerical measure of the success of predictions, *Science*, 4, 453–454, <https://doi.org/10.1126/science.ns-4.93.453.b>, 1884.
- Quérel, A., Meddouni, K., Quélo, D., Doursout, T., and Chuzel, S.: Statistical approach to assess radon-222 long-range atmospheric transport modelling and its associated gamma dose rate peaks, *Adv. Geosci.*, 57, 109–124, <https://doi.org/10.5194/adgeo-57-109-2022>, 2022.
- Rao, K. S.: Uncertainty analysis in atmospheric dispersion modeling, *Pure Appl. Geophys.*, 162, 1893–1917, <https://doi.org/10.1007/s00024-005-2697-4>, 2005.
- Raynaud, L. and Bouttier, F.: Comparison of initial perturbation methods for ensemble prediction at convective scale, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 142, 854–866, <https://doi.org/10.1002/qj.2686>, 2016.
- Raynaud, L., Berre, L., and Desroziers, G.: Accounting for model error in the Météo-France ensemble data assimilation system, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 138, 249–262, <https://doi.org/10.1002/qj.906>, 2012.
- Richardson, D.: Ensembles using multiple models and analyses, *Q. J. Royal Meteor. Soc.*, 127, 1847–1864, <https://doi.org/10.1002/qj.49712757519>, 2001.
- Sato, Y., Takigawa, M., Sekiyama, T. T., Kajino, M., Terada, H., Nagai, H., Kondo, H., Uchida, J., Goto, D., Quélo, D., Mathieu, A., Quérel, A., Fang, S., Morino, Y., von Schoenberg, P., Grahn, H., Brännström, N., Hirao, S., Tsuruta, H., Yamazawa, H., and Nakajima, T.: Model Intercomparison of Atmospheric ^{137}Cs From the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident: Simulations Based on Identical Input Data, *J. Geophys. Res.-Atmos.*, 123, 11748–11765, <https://doi.org/10.1029/2018JD029144>, 2018.
- Saunier, O., Mathieu, A., Didier, D., Tombette, M., Quélo, D., Winiarek, V., and Bocquet, M.: An inverse modeling method to assess the source term of the Fukushima Nuclear Power Plant accident using gamma dose rate observations, *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 11403–11421, <https://doi.org/10.5194/acp-13-11403-2013>, 2013.
- Saunier, O., Korsakissok, I., Didier, D., Doursout, T., and Mathieu, A.: Real-time use of inverse modeling techniques to assess the atmospheric accidental release of a nuclear power plant, *Radioprotection*, 55, 107–115, <https://doi.org/10.1051/radiopro/2020044>, 2020.
- Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N.: Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change, Wiley-Int., 40, 1326, <https://doi.org/10.1080/00139157.1999.10544295>, 1998.
- Seity, Y., Brousseau, P., Malardel, S., Hello, G., Bénard, P., Bouttier, F., Lac, C., and Masson, V.: The AROME-France convective-scale operational model, *Mon. Weather Rev.*, 139, 976–991, <https://doi.org/10.1175/2010MWR3425.1>, 2011.
- Sørensen, J. H., Amstrup, B., Feddersen, H., Bartnicki, J., Klein, H., Simonsen, M., Lauritzen, B., Hoe, S., Israelson, C., and Lindgren, J.: Fukushima accident: uncertainty of atmospheric dispersion modelling (FAUNA), Tech. Rep. 360, Nordic Nuclear Safety Research, http://www.nks.org/en/nks_reports/view_document.htm?id=111010213440189 (last access: 14 December 2022), 2016.
- Sørensen, J. H., Amstrup, B., Bøvith, T., Feddersen, H., Gill, R., Sørensen, M., Vejen, F., Astrup, P., Davis, N. and Lauritzen, B., Hoe, S., Dyve, J., and Lindahl, P.: MEteorological uncertainty of ShOrt-range dispersion (MESO), Tech. Rep. 380, Nordic Nuclear Safety Research, https://www.nks.org/en/nks_reports/view_document.htm?id=111010214043891 (last access: 14 December 2022), 2017.
- Sørensen, J. H., Schönfeldt, F., Sigg, R., Pehrsson, J., Lauritzen, B., Bartnicki, J., Klein, H., Cordt Hoe, S., and Lindgren, J.: Added Value of uncertainty Estimates of SOURCE term and Meteorology (AVESOME), Tech. Rep. 420, Nordic Nuclear Safety Research, https://www.nks.org/en/nks_reports/view_document.htm?id=111010214696230 (last access: 14 December 2022), 2019.
- Sørensen, J. H., Bartnicki, J., Buhr, A. M. B., Feddersen, H., Hoe, S. C., Israelson, C., Klein, H., Lauritzen, B., Lindgren, J., Schönfeldt, F., and Sigg, R.: Uncertainties in atmospheric dispersion modelling during nuclear accidents, *J. Environ. Radioactiv.*, 222, 106356, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2020.106356>, 2020.
- Soulhac, L. and Didier, D.: Projet pX, note de principe pX 1.0. Note technique IRSN, Tech. Rep., DEI/SESUC/08-39, available upon request at: <http://www.irsn.fr/EN/Contact>, 2008.
- Straume, A. G., Koffi, E. N., and Nodop, K.: Dispersion modeling using ensemble forecasts compared to ETEX measurements, *J. Appl. Meteorol.*, 37, 1444–1456, [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1998\)037<1444:DMUEFC>2.0.CO;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1998)037<1444:DMUEFC>2.0.CO;2), 1998.
- Swets, J. A.: The Relative Operating Characteristic in Psychology: A technique for isolating effects of response bias finds wide use in the study of perception and cognition, *Science*, 182, 990–1000, <https://doi.org/10.1126/science.182.4116.990>, 1973.
- Tamura, Y., Suda, K., Sasaki, A., Iwatani, Y., Fujii, K., Ishibashi, R., and Hibi, K.: Simultaneous measurements of wind speed pro-

- files at two sites using Doppler sodars, *J. Wind Eng. Ind. Aerod.*, 89, 325–335, [https://doi.org/10.1016/S0167-6105\(00\)00085-4](https://doi.org/10.1016/S0167-6105(00)00085-4), 2001.
- Tennant, W. and Beare, S.: New schemes to perturb sea-surface temperature and soil moisture content in MOGREPS, *Q. J. Roy. Meteor. Soc.*, 140, 1150–1160, <https://doi.org/10.1002/qj.2202>, 2014.
- Tombette, M., Quentric, E., Quélo, D., Benoit, J., Mathieu, A., Korsakissok, I., and Didier, D.: C3X: A software platform for assessing the consequences of an accidental release of radioactivity into the atmosphere, in: International Radiation Protection Association congress, Geneva, available upon request at: <http://www.irsn.fr/EN/Contact>, 2014.
- Turner, D. B.: Workbook of atmospheric dispersion estimates: an introduction to dispersion modeling, CRC press, ISBN: 9780138733704, <https://doi.org/10.1201/9780138733704>, 1969.
- Werner, C.: Doppler wind lidar, in: *Lidar*, 325–354, Springer, https://doi.org/10.1007/0-387-25101-4_12, 2005.
- Wilks, D. S.: Statistical methods in the atmospheric sciences (Fourth Edition), Elsevier, ISBN: 9780128165270, 2019.
- Wu, S., Sun, K., Dai, G., Wang, X., Liu, X., Liu, B., Song, X., Reitebuch, O., Li, R., Yin, J., and Wang, X.: Inter-comparison of wind measurements in the atmospheric boundary layer and the lower troposphere with Aeolus and a ground-based coherent Doppler lidar network over China, *Atmos. Meas. Tech.*, 15, 131–148, <https://doi.org/10.5194/amt-15-131-2022>, 2022.

Étude complémentaire de la chaîne de modélisation probabiliste de la dispersion atmosphérique PEARO-pX

Sommaire

4.1	Impact de la hauteur de la couche limite atmosphérique	132
4.2	Évaluation statistique des simulations de Doury	132
4.3	Continuité temporelle des ensembles météorologiques et prévisions « sans couture »	135
4.4	Résumé des principaux résultats	142

Les résultats présentés dans ce chapitre constituent une suite et un complément à ceux du chapitre précédent. Il s'agit ici d'approfondir la compréhension de l'impact des incertitudes liées à la météorologie dans les simulations de dispersion atmosphérique à courtes et moyennes échelles (2-20 km). La méthode d'évaluation des prévisions de la dispersion ainsi que les données d'observations radiologiques restent inchangées.

4.1 Impact de la hauteur de la couche limite atmosphérique

Dans le chapitre précédent, nous avons étudié la sensibilité des simulations pX aux champs du vent et aux classes de stabilité atmosphérique. Un autre paramètre susceptible d'influencer les prévisions de dispersion est la hauteur de la couche limite (HCL). Le calcul de ce paramètre, variable diagnostique du modèle AROME, est connu, dans le domaine de la modélisation atmosphérique, pour comporter une part d'erreur systématique et d'incertitude non-négligeable. On se propose d'évaluer l'impact de ce paramètre sur les simulations PEARO-pX.

On choisit, de la même façon que dans le chapitre précédent, trois membres différents de l'ensemble PEARO-pX pour lesquels on effectue cinq simulations, chacune avec une HCL stationnaire et uniforme au lieu de celle issue d'AROME : 250, 500, 750, 1000 et 1250 m (Figure 4.1). On rappelle que la hauteur du rejet retenue pour lancer le modèle pX est la même que dans le chapitre précédent (100 m). Dans la suite de cette partie on ne montre que les résultats concernant les simulations pX-Pasquill, et on note que les conclusions avec les ensembles pX-Doury sont identiques.

Le résultat présenté dans la Figure 4.1 montre qu'avec une CLA de hauteur minimale ($HCL = 250\text{ m}$) l'intensité de quelques pics simulés augmente. Cela est probablement dû au fait que la partie supérieure du panache, qui est généralement très concentrée sous l'effet couvercle de la couche d'inversion au niveau du sommet de la CLA, devient suffisamment proche du sol. Ce comportement reste toutefois non systématique, et généralement on ne constate pas de corrélation significative entre les valeurs de la HCL et les concentrations du ^{85}Kr simulées. Au final, il apparaît que dans le cas d'une HCL stationnaire, les simulations de la dispersion pX sont très peu sensibles aux variations de ce paramètre en entrée du modèle. Ce résultat est dû au fait que cette variable est utilisée dans le modèle pX seulement dans les cas où il y a des réflexions sur la couche d'inversion (cas des situations d'instabilité), et seulement si le panache est suffisamment développé sur la direction verticale. Conséquemment, dans ces situations la HCL n'est pas très influente dans les simulations pX à courte distance.

4.2 Évaluation statistique des simulations de Doury

On présente dans ce paragraphe l'évaluation de la performance statistique des simulations pX-Doury (cf., paragraphe 4.2 de l'article du chapitre 3). Cette évaluation a été réalisée avec la même procédure que celle utilisée pour les ensembles pX-Pasquill. On utilise les mêmes scores probabilistes basés sur les tables de contingence (courbes ROC et

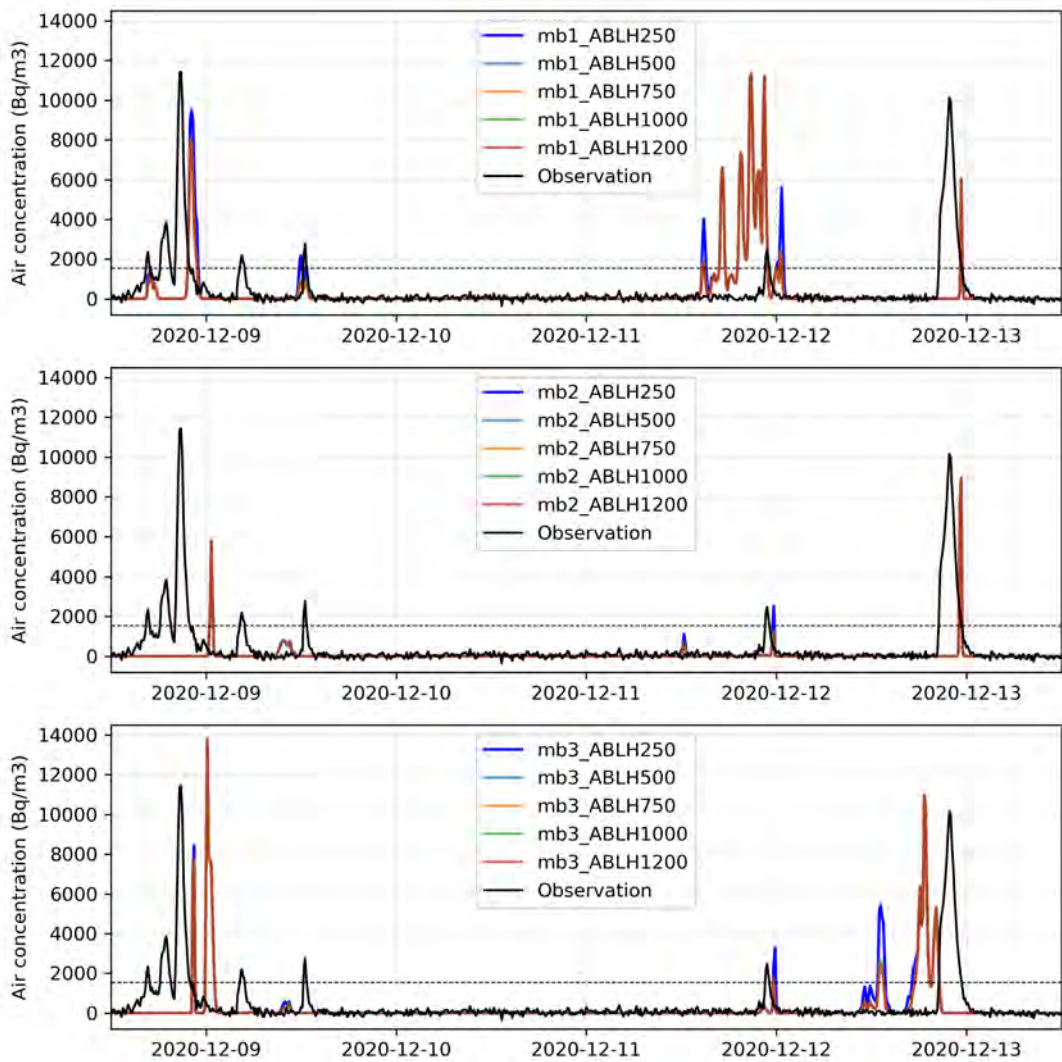


FIGURE 4.1 – Les trois membres de l'ensemble pX-Pasquill (désignés par mb1, mb2 et mb3, de haut en bas) simulant l'activité volumique du ^{85}Kr , dans la station LRC, du 08/12/2020 à 12 :00 UTC au 13/12/2020 à 12 :00 UTC. Chacune des trois simulations a été générée cinq fois, chacune avec une valeur de HCL stationnaire (désignée par ABLH). La ligne horizontale en pointillé indique le seuil de concentration dans l'air ($1545 \text{ Bq}\cdot\text{m}^{-3}$) à partir duquel on considère que les pics sont significatifs.

score PSS) calculés pour les mêmes périodes que celles utilisées dans le chapitre précédent. On rappelle également que pour choisir la gamme des valeurs des paramètres de discrétisation $(\Delta t, \tau)$ représentatives du cas d'étude, on considère une échelle de corrélation temporelle de 3 h. Cela signifie que deux pics du ^{85}Kr correspondent à deux événements différents dès qu'ils présentent un décalage temporel de plus de 3 h. Cela revient donc à former six combinaisons $(\Delta t, \tau)$ différentes.

La Figure 4.2 montre les courbes ROC obtenues après agrégation des données des huit stations de mesures, pour les trois combinaisons représentatives : $(\Delta t = 1 \text{ h}, \tau = 1 \text{ h})$, $(\Delta t = 2 \text{ h}, \tau = 1 \text{ h})$ et $(\Delta t = 3 \text{ h}, \tau = 2 \text{ h})$. Pour les simulations déterministes, toutes les configurations donnent presque le même taux de fausses alarmes, autour de 5%, mais avec une grande différence de taux de détection allant jusqu'à environ 20% de différence entre la meilleure $(\Delta t = 3 \text{ h}, \tau = 2 \text{ h})$ et la plus mauvaise simulation $(\Delta t = 1 \text{ h}, \tau = 1 \text{ h})$. Ces résultats sont similaires à ceux obtenus avec l'ensemble pX-Pasquill présentés au chapitre 3, bien que les taux de détection obtenus avec les écarts-types de Doury soient moins élevés. Pour les simulations d'ensemble pX-Doury, les meilleurs scores sont obtenus avec la même configuration optimale que pour la simulation déterministe. Pour cette configuration optimale on obtient un seuil de décision optimal de 3 membres, correspondant à un $PSS_{max}^{Doury} = 0.63$, contre $PSS_{max}^{Pasquill} = 0.72$ pour l'ensemble avec les écarts types de dispersion de Pasquill .

Au final, on observe qu'avec les deux paramétrisations de stabilité et d'écart-types gaussiens de la dispersion, les meilleurs scores sont obtenus avec la combinaison $(\Delta t = 3 \text{ h}, \tau = 2 \text{ h})$. On note également que les simulations d'ensemble permettent d'optimiser le seuil de décision, et donc d'avoir de meilleurs scores que les prévisions déterministes.

La Figure 4.3 présente le résultat de l'étude de l'effet de la distance par rapport à la source dans le cas des simulations pX-Doury, en utilisant les paramètres de discrétisation optimaux $(\Delta t = 3 \text{ h}, \tau = 2 \text{ h})$. Dans le cas des prévisions déterministes, on trouve une faible différence en terme de taux de fausses alarmes entre les deux groupes de stations, proches (-10km) et lointaines $(+10\text{km})$, alors que la différence en terme de taux de détection est deux fois plus grande que dans le cas des simulations pX-Pasquill (environ 20% de différence), avec un taux de détection d'environ 52% en champ proche contre 35% en champ lointain. En revanche, pour les simulations d'ensemble, les scores probabilistes sont peu sensibles à la distance que le panache a parcouru depuis la source, avec une légère amélioration des scores d'ensembles en champ proche.

Pour résumer l'ensemble des résultats, le Tableau 4.1 présente une comparaison entre les simulations pX-Doury et pX-Pasquill d'une part, et entre les ensembles et les simulations déterministes d'autre part. Dans tous les cas on trouve que les simulations avec les écart-types gaussiens de Pasquill montrent une meilleure performance, que ce soit pour

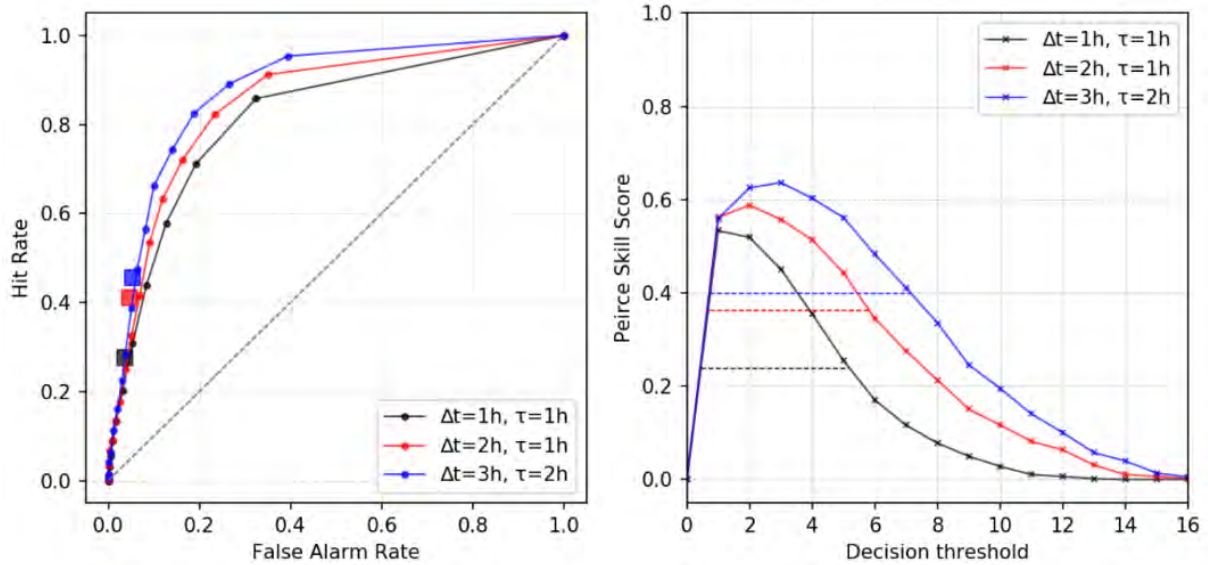


FIGURE 4.2 – Courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus pour les simulations d'ensemble pX-Doury, en agrégeant les simulations et les observations dans toutes les stations de mesures. Chaque courbe représente une configuration $(\Delta t, \tau)$ donnée. Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans la figure de gauche et par les lignes horizontales en pointillés sur celle de droite.

les simulations déterministes ou les simulations d'ensemble. Cela peut être expliqué par le fait que l'on arrive à mieux capturer la variabilité des conditions de stabilité atmosphérique avec six classes (diagnostic de Pasquill) qu'avec deux classes (diagnostic de Doury). Ce résultat est cohérent avec d'autres comparaisons Pasquill-Doury menées sur des campagnes antérieures (Korsakissok and Mallet, 2009), qu'il complète en l'étendant à un cas d'orographie complexe avec une météorologie hétérogène et aux simulations probabilistes. Par ailleurs, dans toutes les expériences, les ensembles sont plus performants que les simulations déterministes. Ce résultat confirme les conclusions du chapitre 3 quant à l'avantage de l'approche probabiliste dans la détection des dépassements de seuil.

4.3 Continuité temporelle des ensembles météorologiques et prévisions « sans couture »

Les prévisions de la dispersion atmosphérique à courte distance (en général jusqu'à quelques dizaines de kilomètres de la source) sont particulièrement intéressantes à l'appui de la prise de décision juste après un accident nucléaire. Dans les parties précédentes nous avons montré l'intérêt des simulations d'ensemble pour la prévision des dépassements de

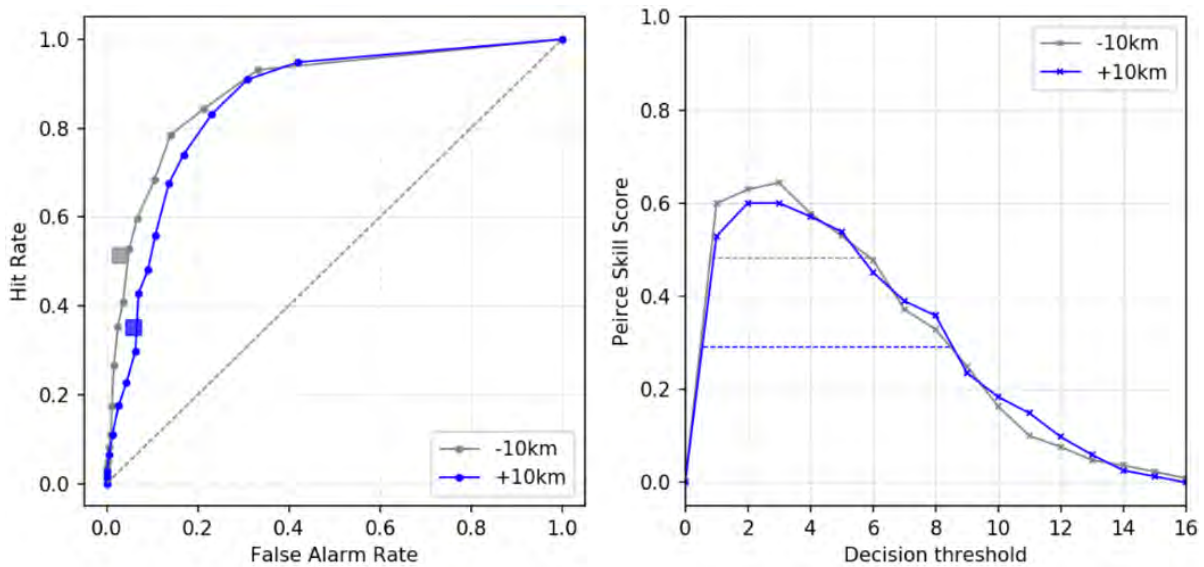


FIGURE 4.3 – Courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus pour les simulations d'ensemble pX-Doury, en agrégeant les données dans les deux groupes de stations : -10km (Beaumont, Digulleville, Gréville, et PUILH) et $+10\text{km}$ (LRC, Ludiver, Octeville et Urville). Chaque courbe représente un groupe de stations. Les scores sont calculés en utilisant la configuration de discrétisation optimale ($\Delta t = 3\text{ h}, \tau = 2\text{ h}$). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans la figure de gauche et par les lignes horizontales en pointillés sur celle de droite.

	pX-Pasquill		pX-Doury	
	Ensemble	Déterministe	Ensemble	Déterministe
meilleure ($\Delta t, \tau$)	(3 h, 2 h)	(3 h, 2 h)	(3 h, 2 h)	(3 h, 2 h)
Seuil de décision optimal	3 membres	–	3 membres	–
PSS max	0.72	0.57	0.63	0.4
Taux de détection	92%	65%	83%	51%
Taux de fausses alarmes	21%	7%	19%	6%

TABLE 4.1 – Comparaison de la performance des simulations pX-Doury et pX-Pasquill dans les configurations déterministes et probabilistes.

seuil de ^{85}Kr . Dans cette partie, nous traitons deux questions. La première est liée au choix de la technique optimale pour construire des prévisions météorologiques continues dans le temps, dans une situation accidentelle de rejets atmosphériques durant plusieurs jours, voire semaines comme lors de la catastrophe de Fukushima. La deuxième question, quant à elle, est liée à la méthode permettant une jointure (ou raccordement) optimale des membres, afin d’obtenir des prévisions météorologiques sans couture (ou cohérentes), où les sauts (qui peuvent être non-physiques) liés aux changements de réseaux de prévisions sont minimisés.

4.3.1 Continuité temporelle des membres PEARO

Afin de générer des prévisions météorologiques d’ensemble continues dans le temps (de l’ordre d’un mois) tout en prenant en compte le contexte accidentel, nous avons utilisé jusqu’à présent la configuration détaillée dans le chapitre précédent, qui consiste en l’utilisation de la prévision lancée à 15 h (UTC) du jour ($J - 1$) pour couvrir le jour (J) (cf, Figure 6 du Chapitre 3). Ce choix a été basé sur le principe d’utiliser un seul réseau de prévisions PEARO, disponible au début d’un jour (00h UTC) et qui est le plus récent.

Dans ce paragraphe, on cherche à étudier s’il est possible d’améliorer la prévision de détection des dépassements de seuil de concentration du ^{85}Kr en exploitant les prévisions météorologiques les plus récentes issues de quatre réseaux de prévisions PEARO au lieu d’un seul. De ce fait, on utilise la méthode détaillée dans la Figure 4.4, qui consiste à construire des ensembles météorologiques dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique en effectuant des changements de prévisions toutes les six heures, soit quatre fois par jour, pour couvrir un jour de 00 h à 23 h. Ainsi, sachant qu’un nouveau réseau est disponible toutes les 6 heures, si on note t_0 l’instant initial d’un réseau, on combine alors les prévision

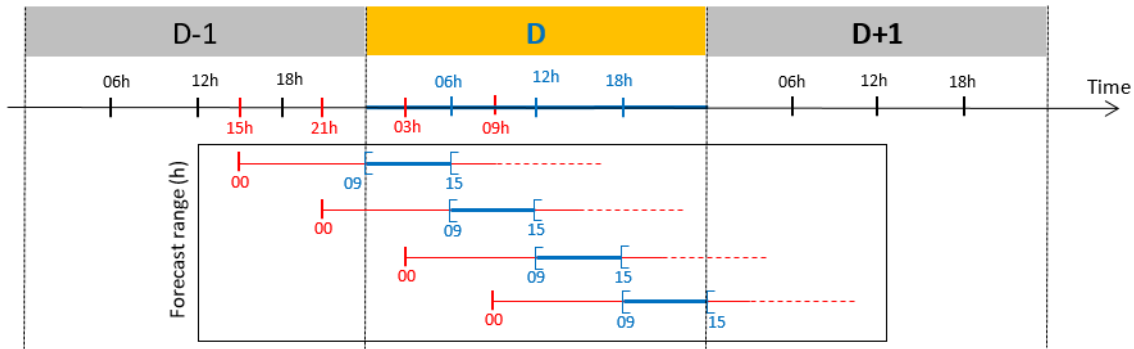


FIGURE 4.4 – Illustration du cycle de configuration à quatre réseaux de prévision pour la construction des ensembles de la PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique (en gras).

entre t_0+9 h et t_0+15 h de chacun des quatre réseaux pour couvrir une journée entière. Cela revient à ignorer les 8 premières échéances de chaque réseau de prévision et à utiliser les 6 échéances qui suivent, afin de répondre aux contraintes opérationnelles qui se manifestent dans le temps de calcul du modèle PEARO, puis le temps de traitement et transfert des sorties. Ainsi, la connexion des quatre intervalles récupérés permet de couvrir les 24 heures d’une journée. Pour les simulations déterministes on procède de la même façon en utilisant les intervalles des échéances de prévisions [12h–18h[des réseaux 12 h et 18 h du jour ($J - 1$) et 00 h et 06 h du jour (J).

La Figure 4.5, montre la comparaison des résultats d’évaluation des simulations de la dispersion PEARO-pX et AROME-pX pour les deux configurations de construction des ensembles météorologiques (4-réseaux et 1-réseau) utilisés pour alimenter le modèle de dispersion pX. Les scores ont été calculés après agrégation des données des stations de mesures radiologiques du ^{85}Kr et sur une période de trois semaines (07–26 janvier 2021). Pour les ensembles de dispersion PEARO-pX, on obtient de meilleurs scores avec la configuration basée sur quatre réseaux de prévisions météorologiques pour les seuils de décision supérieurs ou égaux à 5 membres. Cependant, l’objectif opérationnel étant d’optimiser le système de modélisation de la dispersion atmosphérique, le seuil de décision optimal reste égal à celui obtenu en utilisant un seul réseau météorologique avec un seul changement d’ensemble par jour. En revanche, pour les simulations déterministes AROME-pX, il apparaît que l’utilisation des prévisions météorologiques plus récentes dégrade le calcul de la dispersion atmosphérique, avec des différences de taux de détection et taux de fausses alarmes d’environ 10% et 5%, respectivement. D’un point de vue météorologique, l’utilisation du réseau le plus récent est supposé diminuer l’écart par rapport aux observations, mais cela augmente le nombre de discontinuités non physiques entre deux prévisions. La dégradation des taux de fausses alarmes et de bonnes détections est également visible, sur la Figure 4.6, au travers de pics du ^{85}Kr prévus et non-observés.

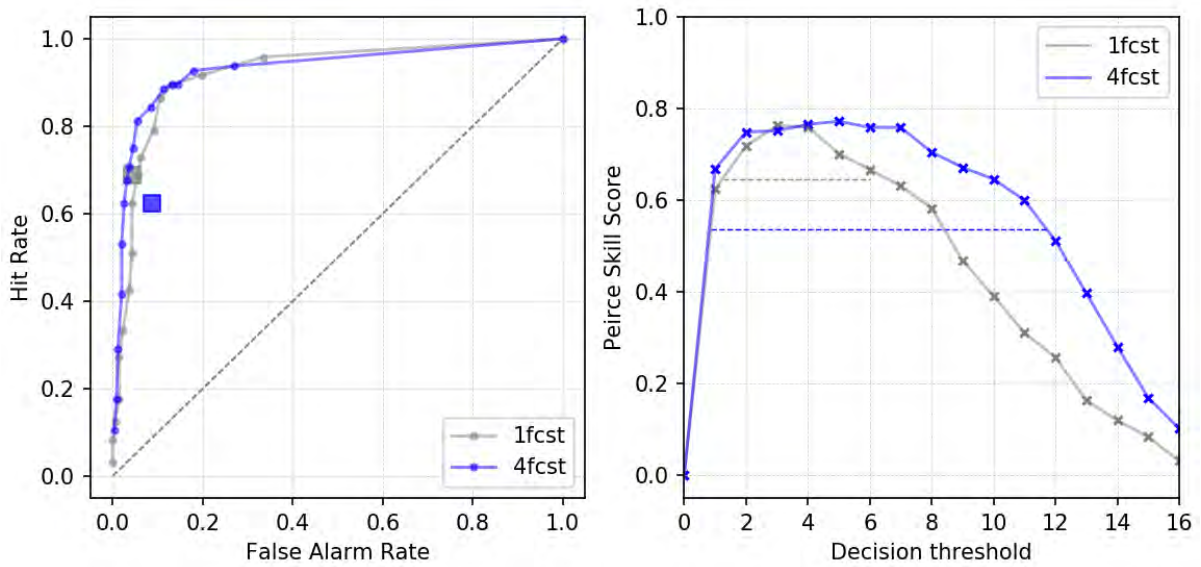


FIGURE 4.5 – Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus avec l'utilisation des deux méthodes de construction des ensembles météorologiques (1fcst désigne la méthode utilisant un seul réseau de prévision et 4fcst la méthode utilisant 4 réseaux). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans les courbes ROC et par les lignes horizontales en pointillé dans le score PSS.

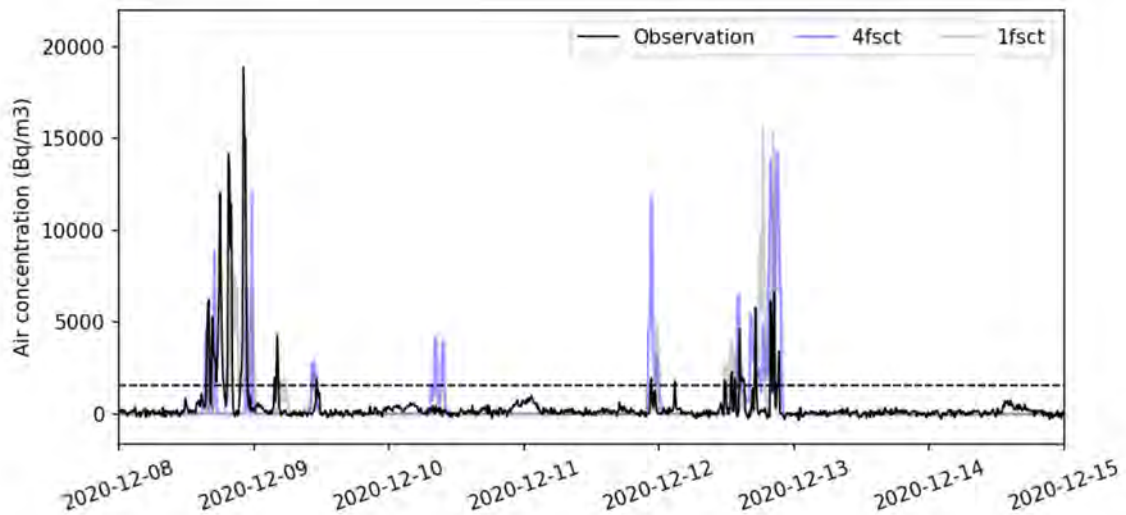


FIGURE 4.6 – Simulations déterministes AROME-pX de la concentration du ^{85}Kr dans l'air, en utilisant les deux méthodes de construction des prévisions météorologiques dédiées au calcul de la dispersion, comparées aux observations radiologiques dans la station Ludiver de 08/12/2020 au 15/12/2020. La ligne horizontale en pointillé indique le seuil de l'activité volumique à partir duquel on considère les pic de ^{85}Kr .

4.3.2 Prévisions météorologiques sans couture

La stratégie utilisée dans tous les résultats précédents pour le raccordement des ensembles PEARO consistait à conserver les mêmes indices des membres au moment de la jointure entre deux réseaux. Cependant, les membres PEARO sont indépendants d'un jour à l'autre ou d'un réseau à l'autre. Autrement dit, le membre (i) d'un réseau de prévision du jour (J) est indépendant du membre (i) du même réseau du jour ($J + 1$). Par conséquent, la jointure des membres utilisée jusqu'à présent est aléatoire, ce qui peut être à l'origine des sauts brusques et non physiques aux moments des changements de réseaux. Par ailleurs, ces discontinuités peuvent conduire ensuite à des erreurs dans les simulations de la dispersion atmosphérique. Ainsi, pour diminuer l'amplitude des discontinuités résultant de la jointure des ensembles, il est intéressant de relier les membres en fonction d'une mesure de leur proximité. Une façon de faire est d'utiliser simplement la méthode du plus proche voisin (Aleksovska et al., 2021), qui consiste à lier un membre donné avec le membre le plus proche, à partir des distances calculées entre les membres. Par contre, cette méthode n'assure pas le critère d'unicité des membres (i.e., problème de répétition des membres), ce qui présente une limitation pour notre cas d'étude. Pour y remédier, nous choisissons d'utiliser l'algorithme d'affectation de Kuhn–Munkres (Kuhn, 1955) (appelé dans la suite Munkres), détaillé dans la section (2.5.3) du chapitre (2), qui permet un raccordement bijectif des membres en minimisant une distance d'affectation globale.

L'application de l'algorithme de Munkres s'appuie sur le calcul d'une matrice de distance entre les membres PEARO sur une période donnée. Dans le présent travail, nous choisissons pour mesurer la distance $d_{i,j}$ entre deux membres i et j la distance euclidienne moyenne *point-par-point* sur tout le domaine, calculée pour le vent, en un point, de la façon suivante :

$$d_{i,j} = \sqrt{\frac{1}{N_t} \sum_{\Delta t} (U_i - U_j)^2 + (V_i - V_j)^2} , \quad (4.1)$$

où U et V représentent, respectivement, les composantes zonale et méridionale du vent (en m.s^{-1}), Δt l'intervalle des échéances utilisées pour le calcul de la distance et N_t le nombre d'échéances dans cet intervalle. Cette durée est fixée à 9 heures précédant le moment du raccordement, soit les intervalles des échéances présentés dans le Tableau 4.2. Ce choix a été retenu, parmi d'autres, après avoir effectué un test de sensibilité à différentes valeurs de Δt .

Avant d'évaluer l'impact de l'utilisation des prévisions météorologiques sans couture sur les simulations de la dispersion, il semble intéressant d'évaluer tout d'abord l'impact de l'algorithme d'affectation de Munkres sur les ensembles PEARO construits. Pour ce

Méthode de construction des ensembles PEARO	Les échéances retenues avant le raccordement	Les échéances retenues après le raccordement
1 réseau de prévision/jour	[24h – 33h[[00h – 09h[
4 réseaux de prévision/jour	[06h – 15h[[00h – 09h[

TABLE 4.2 – Les intervalles des échéances définissant les périodes de calcul des matrices de distances entre les membres PEARO, en fonction de la méthode utilisée pour construire les ensembles PEARO couplés au modèle de dispersion pX.

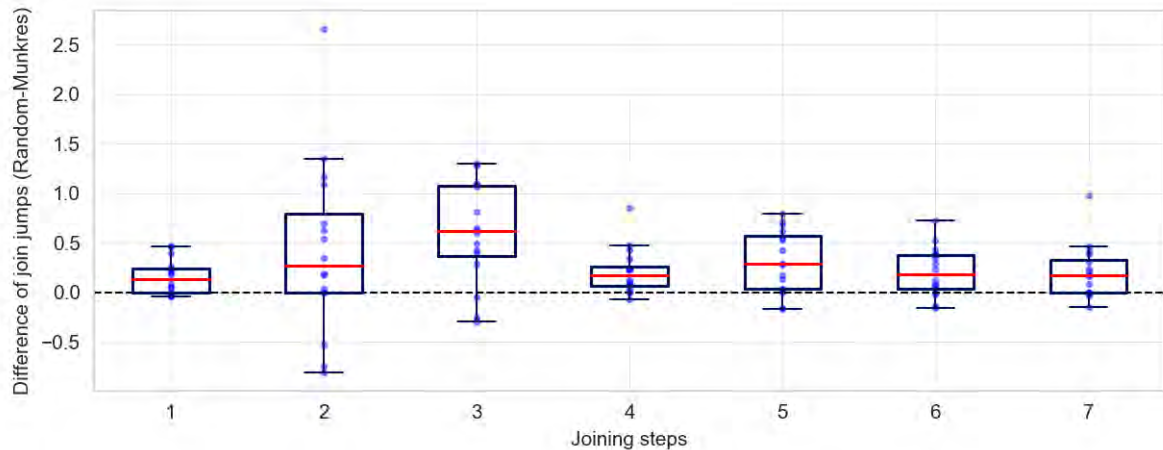


FIGURE 4.7 – Boîtes à moustaches représentant les distributions des différences de distances entre les membres PEARO (en m.s^{-1}) utilisant les deux approches de raccordement aléatoire et Munkres. Les abscisses représentent les moments de raccordement couvrant une période d’une semaine (du 08 au 15/12/2020) dans le cas de l’utilisation d’un seul réseau PEARO pour construire les ensembles, soit un moment de raccordement toutes les 24 heures. Les différences positives indiquent des sauts de raccordement aléatoire supérieurs aux sauts de raccordement Munkres et donc de meilleurs résultats avec ce dernier.

faire, on compare les distances entre chaque membre et son successeur dans le cas d’un raccordement aléatoire et après le calcul des affectations (Figures 4.7 et 4.8). Comme attendu, les résultats montrent que quelle que soit la méthode utilisée pour construire les ensembles PEARO, l’algorithme d’affectation de Munkres est en mesure de fournir des prévisions plus réalistes, en diminuant les discontinuités aux moments de jointures des membres PEARO par rapport à un raccordement aléatoire.

La Figure 4.9 montre le résultat de l’évaluation de l’impact des prévisions PEARO sans couture sur les sorties du modèle pX. On observe que, bien que les discontinuités de jointure aient été corrigées dans les prévisions météorologiques, cela n’a aucun impact sur les simulations de la dispersion atmosphérique. Cela peut être lié à la discontinuité des pics de concentration du ^{85}Kr dans le temps ; pour que l’impact des prévisions PEARO cohérentes soit évident, il faut que les pics du ^{85}Kr aient lieu au moment de la jointure des membres, ce qui arrive rarement.

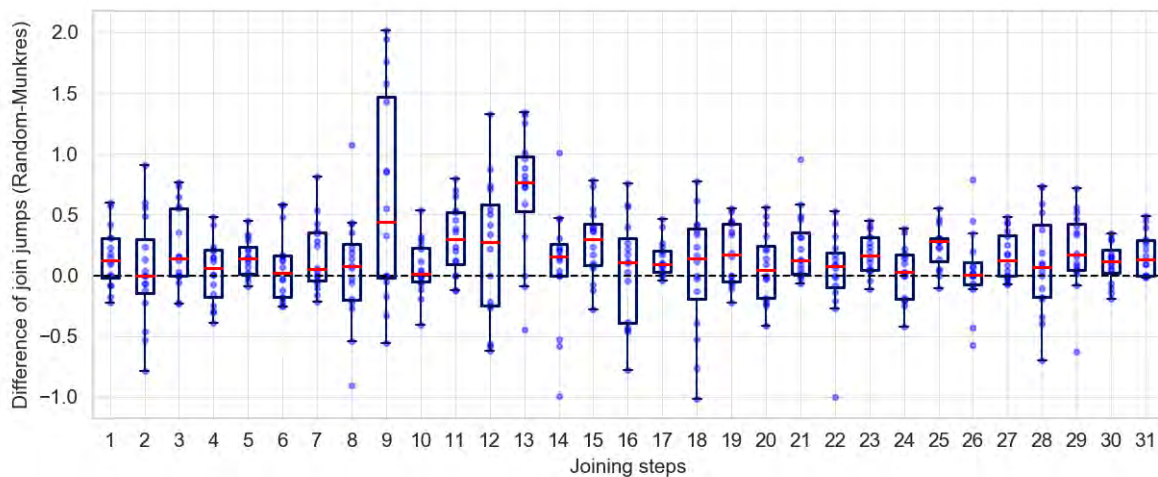


FIGURE 4.8 – Même chose que la Figure 4.7, mais en utilisant 4 réseaux par jour, soit un point toutes les 6 heures, pour construire les ensembles PEARO.

4.4 Résumé des principaux résultats

Dans ce chapitre un certain nombre de résultats obtenus ont été présentés qui sont ici résumés. Premièrement, des tests de sensibilité des simulations de la dispersion à la hauteur de la couche limite ont été réalisés et les résultats montrent que le modèle pX n’est pas sensible à ce paramètre dans les courtes et moyennes échelles (inférieures à 20 km).

Ensuite, la performance statistique des simulations pX-Doury a été évaluée et comparée aux simulations pX-Pasquill (afin de prendre en compte les sources d’incertitudes liées aux approximations du modèle) en utilisant des scores probabilistes identiques. Il apparaît que les incertitudes météorologiques sont plus importantes et les meilleurs scores ont été obtenus en utilisant les lois des écart-types de la dispersion de Pasquill tant dans les champs proches de la source d’émission que dans les champs lointains. En outre, les résultats mettent en avant l’intérêt potentiel des simulations probabilistes au lieu d’une seule simulation déterministe pour la prévision des dépassements du seuil du ^{85}Kr .

Enfin, deux méthodes de construction des ensembles PEARO ont été comparées. La première consiste en l’utilisation, à 00h (UTC) chaque jour, du réseau de prévision le plus récent disponible, alors que la deuxième se base sur l’utilisation de quatre réseaux PEARO par jour. Dans le cas de la prévision déterministe, les résultats ont montré que la meilleure configuration est celle qui utilise un seul réseau, alors que pour l’ensemble les résultats sont similaires. Par ailleurs, nous avons montré que l’algorithme de Munkres permet de générer des prévisions PEARO cohérentes (minimisation des sauts de jointure). En revanche, cela n’apporte pas d’effet sur les sorties du modèle de dispersion pX, ce qui veut dire que les discontinuités ponctuelles, même aux cas où elles sont non physiques, ne représentent pas forcément une source d’erreur significative dans le cas étudié dans ces

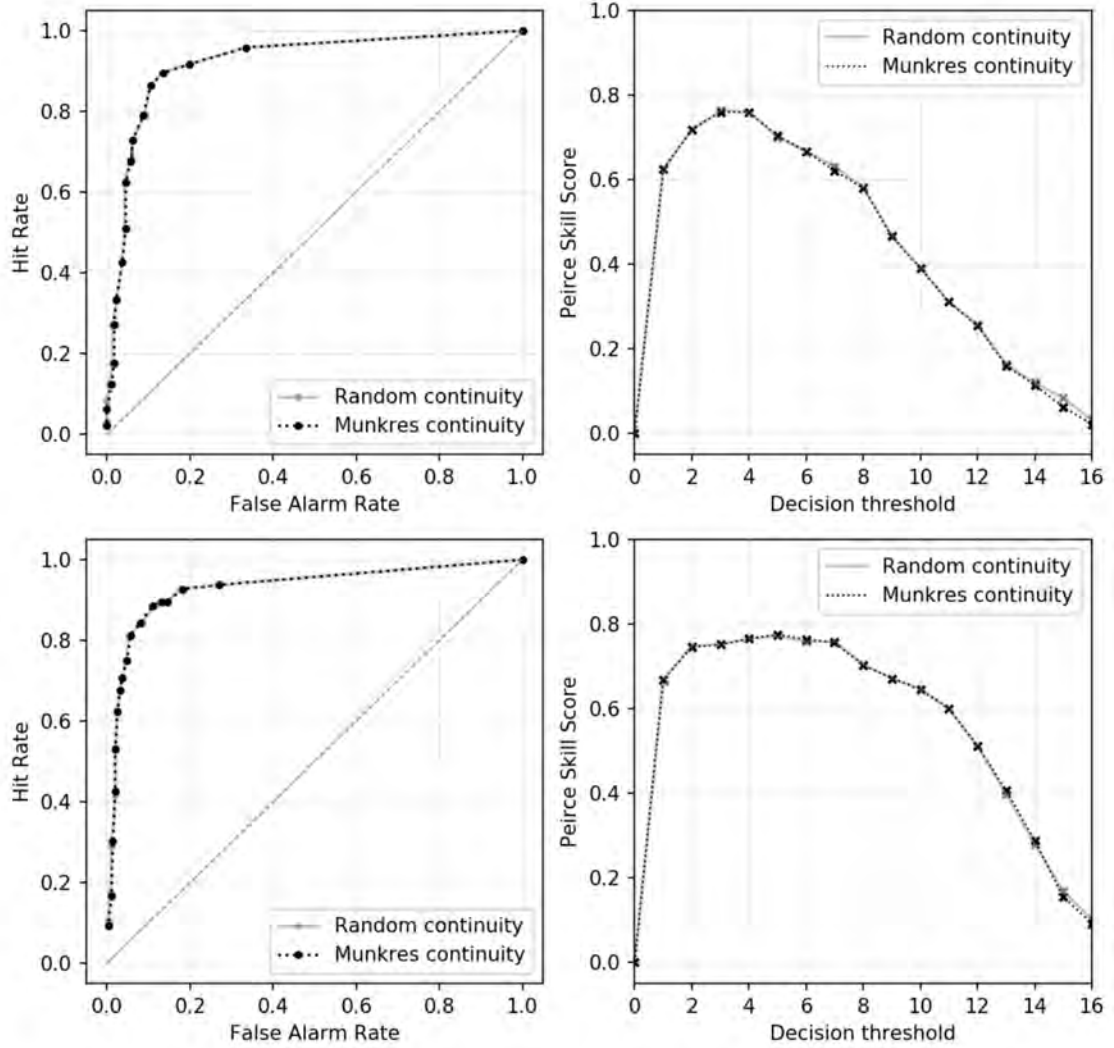


FIGURE 4.9 – Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus après l'utilisation des deux approches du raccordement des membres PEARO (aléatoire et Munkres). En haut : les scores en utilisant un seul réseau de prévision pour la construction des ensembles PEARO. En bas : les scores en utilisant 4 réseaux. La période de calcul est la même que pour les Figures 4.7 et 4.8

travaux de thèse.

Dans le chapitre suivant, les ensembles PEARO seront toujours construits avec la configuration utilisant un seul réseau (15h UTC) et une jointure aléatoire. Pour calculer la dispersion atmosphérique on utilisera les paramétrisations de stabilité atmosphérique de Pasquill.

Clustering et sélection des scénarios météorologiques pertinents pour la dispersion à courte distance en cas d'accidents nucléaires

Sommaire

5.1	Problématique	146
5.2	Configuration du clustering	147
5.3	Impact du clustering sur les sous-ensembles météorologiques	156
5.4	Cartes de décision : un outil stratégique pour la gestion des crises nucléaires	158
5.5	Évaluation des cartes de décision	161
5.6	Évaluation des sous-ensembles de la dispersion par rapport aux ob- servations radiologiques du ^{85}Kr	169
5.7	Résumé des principaux résultats	170

Dans ce chapitre nous abordons tout d'abord les enjeux opérationnels, dans le contexte de la prévision de la dispersion accidentelle, de la classification non-supervisée appliquée aux ensembles météorologiques PEARO utilisés en entrée du modèle de dispersion pX. Ensuite, la configuration des algorithmes utilisés et leur implémentation sont présentées, et une méthode d'évaluation météorologique du clustering est présentée. Nous terminons par l'évaluation de l'impact du clustering sur les simulations d'ensemble de la dispersion PEARO-pX.

5.1 Problématique

Lors des situations de crise radiologique impliquant des rejets de substances radioactives dans l'atmosphère, l'IRSN, via son Centre Technique de Crise (CTC), réalise des simulations de la dispersion atmosphérique qui seront utilisées pour conseiller les autorités pour la prise de décision. Les actions de protection des populations qui peuvent être mises en oeuvre, sur la base des projections de l'IRSN de dépassement des niveaux guides de dose réglementaires, sont par exemple l'évacuation, la mise à l'abri ou l'ingestion de pastilles d'iode stable pour protéger la thyroïde. Dans les chapitres précédents nous avons montré que les prévisions probabilistes de la dispersion atmosphérique sont en mesure de fournir des prévisions de dépassements de seuils plus fiables qu'une seule prévision déterministe. Toutefois, l'implémentation et l'utilisation de systèmes de modélisation probabilistes à haute résolution spatiale et temporelle, entre le transfert et le post-traitement des prévisions météorologiques et la simulation de la dispersion, nécessitent généralement un temps de calcul conséquent, difficilement compatible avec les contraintes opérationnelles de la gestion de crise.

Face à ces exigences d'efficacité dans l'utilisation et le traitement des prévisions probabilistes, on propose, dans ce travail, une démarche basée sur la réduction de la taille des ensembles météorologiques utilisés pour le calcul de la dispersion. Pour ce faire, on utilise les algorithmes de classification non-supervisée présentés dans le Paragraphe (2.6.3) du Chapitre (2), pour regrouper les membres PEARO. La première question à laquelle nous tenterons de répondre est donc : **Comment configurer les algorithmes du clustering, dans le contexte des simulations de dispersion atmosphérique de radionucléides, afin d'avoir le meilleur compromis entre la qualité des résultats (convergence optimale) et le temps de calcul (i.e., traitement des données et calcul de la dispersion) ?**

Pour synthétiser l'information météorologique en entrée des modèles de dispersion, un sous-ensemble est construit à partir des classes de membres PEARO, formée par clustering, en sélectionnant pour chaque classe un membre représentatif (Bouttier and Raynaud, 2018). Par ailleurs, la propagation d'un sous-ensemble météorologique par le modèle de dispersion pX doit permettre d'obtenir un sous-ensemble de la dispersion représentatif de l'incertitude de l'ensemble complet PEARO-pX. Cela revient à dire qu'un « bon » clustering en entrée du modèle pX permet d'obtenir, en sortie, un sous-ensemble qui reproduit toute la gamme des scénarios potentiels de la dispersion de la masse radioactive rejetée. Le second point abordé dans ce chapitre est donc : **Comment évaluer la qualité du clustering des membres PEARO et quelle est la meilleure façon de quantifier son impact sur les sorties du modèle pX ?**

Enfin, lors d'une situation de crise, la prise d'une décision éclairée à partir d'un en-

semble de résultats purement techniques est souvent difficile. Nous tenterons donc d'apporter des éléments de réponse à la question suivante : **Comment synthétiser les résultats probabilistes et les présenter à des non-spécialistes**¹ ?

5.2 Configuration du clustering

Comme évoqué dans le Paragraphe (2.6.3) du Chapitre (2), la mise en oeuvre d'un algorithme de clustering nécessite, en amont, des prétraitements afin de sélectionner les meilleurs ingrédients permettant d'obtenir un partitionnement satisfaisant des données d'entrée. Dans la suite de ce chapitre, nous détaillons donc les différents diagnostics et les choix qui ont été faits pour mettre en place la configuration optimale du processus de clustering² utilisé dans cette étude. Les expériences sont effectuées sur une période de trois semaines entre le 07 et le 27 janvier 2021, dans un domaine de 60×60 km centré autour de l'usine Orano La Hague au Nord-Cotentin, et les mesures radiologiques du ⁸⁵Kr seront utilisées pour la validation des résultats.

5.2.1 Algorithmes du clustering

Pour le choix de la méthode de clustering appropriée à notre cas d'étude, nous rappelons que nous utilisons dans ce manuscrit les trois algorithmes présentés précédemment (c.f., Chapitre 2, Paragraphe 2.6.3) : (i) K-means, qui est de type clustering par partitionnement ; clustering hiérarchique ascendant avec deux approches possibles (ii) complete-linkage et (iii) Ward. Pour évaluer la pertinence de ces méthodes, elles seront comparées à un sous-ensemble aléatoire (appelé aussi référence dans la suite du chapitre), construit en tirant au hasard un nombre de membres (identique à celui du clustering) de PEARO.

5.2.2 Mesure de similarité entre les membres PEARO

La métrique utilisée dans ce chapitre, pour mesurer la distance entre les champs atmosphériques PEARO, est inspirée des travaux de [Bouttier and Raynaud \(2018\)](#) qui présentent la façon de sélectionner les 16 membres PEARP³ définissant les conditions aux bords de la PEARO à l'aide de méthodes de clustering.

Pour calculer la similarité entre deux membres PEARO, on utilise une distance euclidienne, sous forme d'une distance moyenne quadratique, calculée *point-par-point* sur le

1. Les décideurs qui déclenchent les actions de protection lors d'une situation de crise nucléaire.
 2. En générale, le processus de clustering se divise en trois étapes : (i) préparation des données d'entrée, (ii) sélection des paramètres optimaux et (iii) validation et interprétation des résultats.
 3. Prévision d'Ensemble ARPEGE, système de prévision d'ensemble global de Météo-France.

même domaine de calcul que celui définit dans les chapitres précédents : $60 \text{ km} \times 60 \text{ km}$ centré autour de l'usine Orano La Hague, soit 24×24 points de grille.

Soient $\psi^{(k)}$, ($k = 1, 2, \dots, n$) les n champs atmosphériques d'intérêt, normalisés et adimensionnalisés. La distance $D_{i,j}$ entre deux membres i et j est donnée par l'équation suivante :

$$D_{i,j} = \sqrt{\frac{1}{N_{pts}} \sum_{N_t} \sum_{N_x} \sum_{N_y} \sum_{N_z} (\psi_i^{(1)} - \psi_j^{(1)})^2 + (\psi_i^{(2)} - \psi_j^{(2)})^2 + \dots + (\psi_i^{(n)} - \psi_j^{(n)})^2} \quad (5.1)$$

Où N_t , N_x , N_y et N_z représentent, respectivement, les nombres de points dans la dimension temporelle, latitudinale, longitudinale et verticale. $N_{pts} = N_t \times N_x \times N_y \times N_z$ est le nombre total de points sur toutes les dimensions de définition des champs $\psi^{(k)}$.

5.2.3 Variable prédictive

On appelle *variable prédictive* le (ou les) champ(s) atmosphérique(s) utilisé(s) dans un algorithme de clustering donné, pour calculer les distances entre les membres PEARO afin de les catégoriser. Dans le présent travail, le choix des variables prédictives s'est naturellement basé sur l'étude de sensibilité des simulations de la dispersion PEARO-pX réalisée dans les deux chapitres précédents. Les deux variables d'intérêt utilisées sont, en conséquence, le vent, avec ses deux composantes zonale et méridionale, et la stabilité atmosphérique qui est calculée à partir du diagnostic basé sur le gradient de température à 100 m (∇T_{100m}). Cependant, l'utilisation des classes de stabilité diagnostiquées pour le clustering peut être une source supplémentaire d'erreur en sortie du clustering, à cause des approximations de calcul de la stabilité. De plus, l'utilisation d'une variable continue, telle que ∇T_{100m} , peut être plus appropriée pour assurer la finesse des résultats du clustering, au contraire d'une variable discrétisée (les six classes de Pasquill). Au final, on utilise, en plus du vent, la quantité ∇T_{100m} en lieu et place des classes de stabilité. Une autre configuration est aussi testée, qui prend comme variable prédictive uniquement le vent, variable clé de la dispersion atmosphérique (Girard et al., 2014; El-Ouartassy et al., 2022). Ainsi, pour le calcul des distances on aura deux configurations :

- L'utilisation d'une seule variable prédictive : le vent. Dans ce cas, les deux composantes zonale (U) et méridionale (V) du vent sont intégrées dans l'équation (5.1) :

$$D_{i,j} = \sqrt{\frac{1}{N_{pts}} \sum_{N_t} \sum_{N_x} \sum_{N_y} \sum_{N_z} (U_i - U_j)^2 + (V_i - V_j)^2} \quad (5.2)$$

- L'utilisation de deux variables prédictives : le vent (U, V) et ∇T_{100m} . Dans ce

cas, il est nécessaire de faire une normalisation pour que tous les champs aient un poids similaire dans le calcul de distance. Pour ce faire, pour chaque champ atmosphérique ψ ($\psi = (U, V)$ ou ∇T_{100m}), le champ normalisé ψ^* utilisé dans le calcul de la distance est obtenu en retranchant la moyenne μ_ψ et en divisant par l'écart-type σ_ψ , les deux quantités étant calculées sur les 16 membres PEARO pour chaque instant t , chaque point de grille et pour chaque niveau vertical :

$$\psi^* = \frac{\psi - \mu_\psi}{\sigma_\psi} \quad (5.3)$$

Les champs normalisés sont ainsi intégrés dans l'équation (5.1) pour calculer les distances entre les membres :

$$D_{i,j} = \sqrt{\frac{1}{N_{pts}} \sum_{N_t} \sum_{N_x} \sum_{N_y} \sum_{N_z} (U_i^* - U_j^*)^2 + (V_i^* - V_j^*)^2 + (\nabla T_i^* - \nabla T_j^*)^2} \quad (5.4)$$

5.2.4 Réduction de dimension

La réduction de dimension est une étape préliminaire classique dans les problèmes de clustering visant à compresser et synthétiser l'information tout en conservant au mieux la variance du jeu de données de départ. L'intérêt de ce processus est lié principalement aux enjeux de coût de calcul et d'interprétabilité du jeu de données de départ. Parmi les méthodes classiques les plus utilisées en météorologie pour faire la réduction de dimension, on trouve l'Analyse en Composantes Principales (ACP) (Anwender et al., 2008; Kumpf et al., 2017). Le principe de cette méthode consiste à projeter le jeu de données, initialement défini dans un espace construit par les variables de départ, sur un nouvel espace latent défini par un nombre limité de vecteurs orthogonaux, appelés « composantes principales », de façon à ce que la variance des données projetées sur ces vecteurs soit maximale (Hotelling, 1933). Dans ce manuscrit, chaque membre PEARO est défini sur un espace à cinq axes (variable, temps, latitude, longitude, altitude), conduisant à une dimension totale de chaque membre égale à $4 \times 480 \times 24 \times 24 \times 25 = 27.648 \times 10^6$ (Tableau 5.1). Le temps de calcul étant l'enjeu principal de notre cas d'étude, des tests préliminaires ont été effectués et ont montré qu'avec cette dimension de départ il n'est pas utile de faire appel à des méthodes de réduction de dimension sophistiquées qui représenteraient un coût de calcul supplémentaire. Il est possible de se contenter de réduire la dimension totale des membres PEARO par un simple échantillonnage des dimensions de départ.

L'évaluation des prévisions PEARO au Nord-Contentin a montré l'influence importante des champs météorologiques par les effets locaux (orographie complexe ainsi que les surfaces hétérogènes en bord de mer) dans cette zone (El-Quartassy et al., 2022). Pour cette raison, on propose de ne pas réduire la dimension temporelle, afin de mieux capturer

Axes	Dimension en entrée de pX	Dimension en entrée du clustering (par jour)
Variables	4 (U, V, stabilité, HCL)	2 (U, V) ou 3 (U, V, ∇T)
Temps (t)	jours \times heures = $20 \times 24 = 480$	heures = 24
Latitude (x)	24	24
Longitude (y)	24	24
Altitude (z)	25 pour le vent, 1 pour la stabilité et HCL	1 (un seul niveau vertical du vent)
Total	27.648×10^6	27 648 ou 41 472

TABLE 5.1 – Comparaison de l'espace de définition des membres PEARO en entrée du modèle pX (avant la réduction de dimension) et en entrée des algorithmes de clustering (après la réduction de dimension).

la variabilité des champs au cours de la journée, ainsi que les deux dimensions spatiales horizontales (longitudes et latitudes) afin de capturer la grande variabilité spatiale qui peut être due aux effets locaux. Par ailleurs, des tests de sensibilité effectués montrent une très faible influence des niveaux verticaux du vent sélectionnés sur la qualité de la classification. À la lumière de tous ces éléments, **il a été décidé de lancer les expériences de clustering une fois par jour après la réduction de la dimension verticale du vent seulement, en se limitant à un seul niveau vertical correspondant à la hauteur physique d'émission ($z=100$ m)**. Cela conduit ainsi à une dimension totale de chaque membre et dans chaque jour, en entrée du clustering, égale à $2 \times 24 \times 24 \times 24 = 27\,648$ dans le cas d'une seule variable prédictive (i.e., le vent), ou bien $3 \times 24 \times 24 \times 24 = 41\,472$ dans le cas de deux variables prédictives (Tableau 5.1).

5.2.5 Estimation du nombre de clusters optimal

Dans le contexte de la classification non-supervisée, et particulièrement quand on s'intéresse au partitionnement des données multidimensionnelles, la qualité du résultat final du clustering dépend fortement du nombre de clusters (noté K) retenu (Lachkar et al., 2006). Autrement dit, pour le même jeu de données de départ, des résultats très différents peuvent être obtenus selon le nombre de clusters fixé au préalable. Ce sujet a été traité dans plusieurs études pour différentes applications (Jain et al., 1999).

Fixer une valeur K représente souvent une tâche difficile et subjective, et généralement il existe deux approches utilisées pour ce faire : (i) la connaissance *a priori* du problème étudié et (ii) l'utilisation des *indices de validité*.

Dans la première approche, l'utilisateur (i.e., le modélisateur) fait appel à sa connaissance et sa maîtrise du problème traité et le jeu de données mis à disposition. Cette idée est abordée dans les travaux de Hennig (2019) qui suggère que c'est à l'utilisateur de

s’interroger en amont sur les bonnes formulations qui correspondent au problème du clustering étudié. Dans le présent travail, sur avis d’expert, et dans le contexte de la gestion de crise, il est recommandé que le résultat final ne dépasse pas 50% de la totalité des scénarios de dispersion représentés par l’ensemble absolu PEARO-pX, soit $K \leq 8$ membres. Au-delà de ce seuil le clustering n’aurait plus d’intérêt du point de vue opérationnel.

La deuxième approche, quant à elle, est purement statistique et se base sur la mesure de certaines caractéristiques de la classification à l’aide des indices de validité. Cependant, ces indices peuvent conduire à des conclusions très variées quand ils mesurent des propriétés différentes. À titre d’exemple, l’indice de Silhouette (Rousseeuw, 1987) est utilisé pour quantifier à quel point un clustering répond aux exigences d’homogénéité et de séparation, alors que l’indice de Rand ajusté (Rand, 1971) mesure la stabilité d’un clustering. Il est ainsi fréquent que ces deux indices ne soient souvent pas concordants pour évaluer une même classification. Cette problématique pour fixer un nombre de classes, de façon objective, pour catégoriser les champs atmosphériques a été largement abordée dans plusieurs travaux comme ceux de Fereday et al. (2008), Neal et al. (2016) et Mounier (2022).

Dans le présent travail, afin de valider le choix du nombre de classes basé sur l’expertise, il a été décidé d’utiliser une autre méthode très répandue en météorologie, notamment dans des problématiques de classification des champs du vent. Cette méthode est connue sous le nom de méthode du coude (elbow en anglais) (Dong et al., 2016), et son principe est que l’inertie intra-cluster peut être réduite grâce à l’augmentation du nombre de clusters. En d’autres termes, on lance récursivement un algorithme de clustering avec plusieurs valeurs croissantes de K , puis on s’intéresse au pourcentage de la variance expliquée par chaque classe et on s’attend à ce que l’hétérogénéité du clustering diminue. Ainsi, la représentation graphique des valeurs de l’inertie intra-cluster en fonction du nombre de clusters permet d’obtenir une courbe décroissante, et le meilleur nombre de clusters correspond au point d’inflexion de la courbe. Au-delà de ce point, l’ajout d’un nouveau cluster n’améliore plus significativement la performance du clustering⁴. On note qu’il est toutefois possible que la méthode du coude indique l’existence de plusieurs choix optimaux de nombre de classes. Dans ce cas, les meilleures valeurs sont associées, dans la courbe $inertie = f(K)$, à des sauts significatifs de la variance intra-cluster.

La Figure 5.1 montre le résultat de la méthode du coude indiquant quelques nombres de classes préférentiels pour chacun des trois algorithmes de clustering testés. Pour les méthodes hiérarchiques, un nombre de classes optimal semble être $K \leq 5$ membres pour la méthode complete-linkage et $K \leq 4$ membres pour la méthode de Ward. Pour la méthode K-means, le nombre de classes optimal est moins évident, mais un nombre de classes

4. L’amélioration de la performance du clustering désigne, dans ce cas, la minimisation de l’inertie (ou variance) intra-cluster.

$K \leq 6$ membres semble être un bon choix. Par ailleurs, on montre facilement, à l'aide de quelques expériences, que les panaches de dispersion correspondant à un nombre de classes $K \leq 3$ membres sont largement insuffisants pour couvrir une portion importante de l'aire du panache complet (i.e., PEARO-pX), notamment dans les situations du vent faible où la direction du vent devient très incertaine et conduit à des panaches très dispersés dans l'espace. En combinant ces résultats avec la recommandation basée sur l'expertise du sujet étudié ($K \leq 8$), **un nombre de classes $K=4$ a été retenu pour la suite de l'étude.**

5.2.6 Membre représentatif de chaque cluster

La dernière étape du clustering est la construction, pour chaque jour de la période d'étude, d'un sous-ensemble météorologique en choisissant un membre représentatif par cluster. La jointure des sous-ensembles journaliers construits, permet ainsi de couvrir toute la période envisagée pour le calcul de la dispersion atmosphérique. Là encore, il existe plusieurs méthodes de sélection des membres représentatifs. Dans notre étude, on applique la méthode utilisée dans les travaux de [Bouttier and Raynaud \(2018\)](#), détaillée ci-dessous.

Présentation de la méthode

Le membre représentatif d'un cluster est celui qui minimise l'indice de représentativité défini comme le rapport entre (a) la distance moyenne de ce membre par rapport aux membres de son cluster et (b) sa distance moyenne par rapport aux membres des autres clusters (Figure 5.2).

Développement mathématique

Pour un cluster \mathcal{C}_k d'une classification $\mathcal{C} = \bigcup_{k=1}^K \mathcal{C}_k$, la distance moyenne d'un membre $x_i \in \mathcal{C}_k$ par rapport aux autres membres contenus dans son cluster est :

$$a(x_i) = \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{C}_k) - 1} \sum_{\substack{x \in \mathcal{C}_k \\ x \neq x_i}} D(x_i, x) \quad (5.5)$$

Avec $\text{Card}()$ la fonction qui associe à un cluster le nombre d'éléments qu'il contient.

La distance moyenne du même membre x_i par rapport aux membres des autres clusters $\mathcal{C}_j (j \neq k)$ est :

$$b(x_i) = \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{C}) - \text{Card}(\mathcal{C}_k)} \sum_{\substack{x \in \mathcal{C}_j \\ j \neq k}} D(x_i, x) \quad (5.6)$$

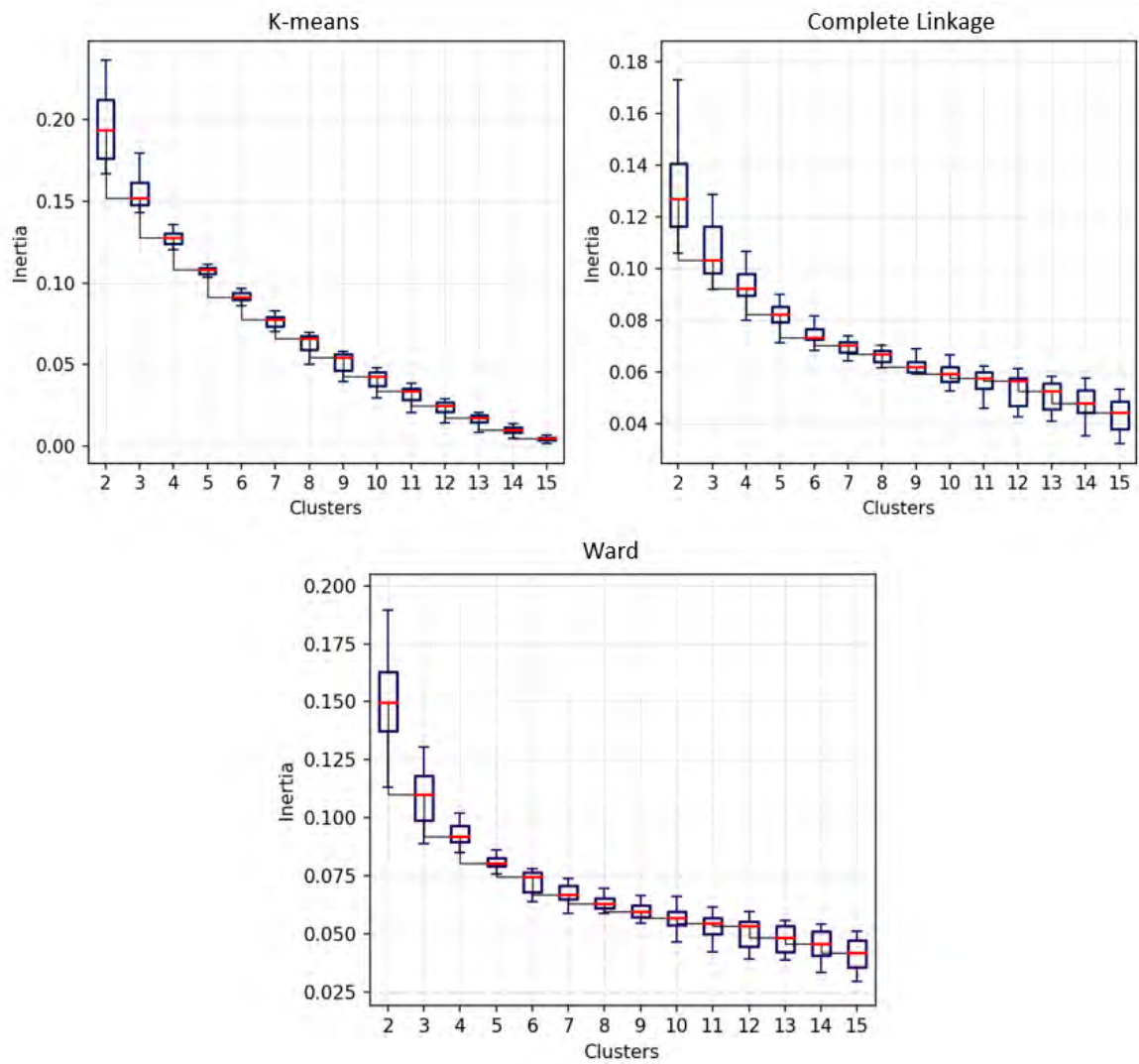


FIGURE 5.1 – L’inertie intra-cluster en fonction du nombre de classes pour chacune des méthodes de clustering, calculée dans la période 07–20 janv. 2021. Les boîtes à moustache représentent les distributions de l’inertie calculée chaque jour. Les médianes des distributions (traits rouges) sont liées par la courbe noire.

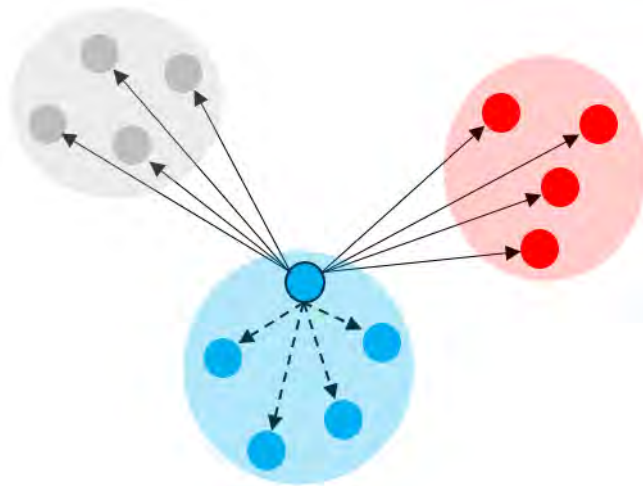


FIGURE 5.2 – Exemple de calcul de l'indice de représentativité pour un membre d'un cluster. Les flèches en pointillé représentent les distances du membre par rapport aux autres membres de son cluster, tandis que les flèches en continu indiquent les distances du membre par rapport aux membres des autres clusters. L'indice de représentativité de ce membre est ainsi le rapport de la moyenne des deux distances. Le même processus est répété pour tous les membres d'un cluster, et le membre retenu est celui qui minimise l'indice de représentativité.

On définit ainsi l'indice de représentativité associé au membre x_i comme le rapport des deux quantités $a(x_i)$ et $b(x_i)$:

$$I_r(x_i) = \frac{a(x_i)}{b(x_i)} \quad (5.7)$$

Enfin, le membre représentatif x_k du cluster \mathcal{C}_k est celui qui minimise l'indice $I_r(x_i)$:

$$x_k = \arg \min_{x_i \in \mathcal{C}_k} \{I_r(x_i)\} \quad (5.8)$$

Méthode numérique

Pour calculer le membre représentatif de chaque cluster, on a développé une fonction en langage Python qui suit le schéma suivant :

Algorithm 1 Membres représentatifs**Input** : la classification $\mathcal{C} = \bigcup_{k=1}^K \mathcal{C}_k$ **Output** : les membres représentatifs $\{x_1, x_2, \dots, x_K\}$

```

1: for  $k \in \{1, 2, \dots, K\}$  do
2:   for  $x_i \in \mathcal{C}_k$  do
3:      $a(x_i) \leftarrow \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{C}_k)-1} \sum_{\substack{x \in \mathcal{C}_k \\ x \neq x_i}} D(x_i, x)$ 
4:      $b(x_i) \leftarrow \frac{1}{\text{Card}(\mathcal{C})-\text{Card}(\mathcal{C}_k)} \sum_{\substack{x \in \mathcal{C}_j \\ j \neq k}} D(x_i, x)$ 
5:      $I_r(x_i) \leftarrow \frac{a(x_i)}{b(x_i)}$ 
6:   end for
7:    $x_k \leftarrow \arg \min_{x_i \in \mathcal{C}_k} \{I_r(x_i)\}$ 
8: end for
9: return  $\{x_1, x_2, \dots, x_K\}$ 

```

Pour résumer cette section, le Tableau 5.2, ci-dessous, récapitule les éléments de configuration adoptés pour classifier les membres PEARO et pour choisir un membre représentatif par cluster.

Algorithmes de clustering	<ul style="list-style-type: none"> — Hiérarchique – Complete-Linkage, — Hiérarchique – Ward, — K-means.
Mesure de similarité	Distance moyenne quadratique point-par-point.
Variable prédictive	<ul style="list-style-type: none"> — Une seule variable : (U, V) — Deux variables : (U, V)+∇T_{100m}
Réduction de dimension	Considération d'un seul niveau vertical du vent : hauteur physique d'émission 100 m.
Nombre de clusters optimal	$K = 4$ clusters
Membre représentatif (x_k)	Celui qui minimise l'indice de représentativité I_r : $x_k = \arg \min_{x_i \in \mathcal{C}_k} \{I_r(x_i)\}$; Avec : $I_r(x_i) = \frac{a(x_i)}{b(x_i)}$

TABLE 5.2 – Récapitulatif des éléments de configuration des expériences de clustering réalisées dans ce manuscrit.

5.3 Impact du clustering sur les sous-ensembles météorologiques

Dans la section précédente nous avons détaillé les éléments de conception et d'implémentation des méthodes de clustering. Cependant, avant d'utiliser l'ensemble météorologique des 4 membres représentatifs, issu du clustering, pour calculer la dispersion atmosphérique, il est important d'évaluer sa qualité. Cette étape intermédiaire est incontournable afin d'évaluer à quel point ces sous-ensembles sont en mesure de représenter au mieux l'incertitude de l'ensemble complet PEARO.

Pour ce faire, on utilise deux scores probabilistes classiques : le ratio spread-skill et le CRPS. Étant donné que le vent à 100 m ainsi que le gradient de température représentent les variables prédictives fixées pour le calcul du clustering, et comme nous ne disposons pas de suffisamment d'observations de température, ces deux scores sont calculés par rapport aux mesures ultrasoniques du vent à 100 m fournies par le Sodar déjà utilisé dans le Chapitre 3. On rappelle que cet instrument est installé à proximité du point source (i.e., l'usine Orano La Hague), qui se situe au centre du domaine de calcul de la dispersion atmosphérique. On rappelle aussi que la période d'étude dans ce chapitre est de trois semaines allant du 07 au 27 janvier 2021.

5.3.1 Diagnostic du spread-skill

La Figure 5.3 montre l'impact du clustering sur la fiabilité de la dispersion des sous-ensembles construits comparés à un sous-ensemble aléatoire de même taille. La significativité des écarts constatés entre les résultats obtenus entre chaque méthode de clustering et l'ensemble aléatoire a été évaluée à l'aide du test de Wilcoxon. Le test montre que les différences sont toujours significatives.

Pour la vitesse du vent, on observe pour toutes les expériences, une forte sous-dispersion, avec une tendance d'augmentation du spread-skill au cours des échéances, et un score moyen autour de 0.6. Cette forte sous-dispersion peut être, en partie, due au fait que le score est calculé sans tenir compte de l'erreur d'observation. Cela entraîne une surestimation de l'incertitude réelle et, sur les courbes spread-skill, une impression de forte sous-dispersion qui n'est peut-être pas si importante en réalité. Cependant, les méthodes de clustering permettent d'améliorer la dispersion des sous-ensembles construits, par rapport au sous-ensemble aléatoire. Par ailleurs, la méthode complete-linkage est légèrement meilleure que les deux autres méthodes dans les 14 premières échéances de prévisions (9–23h), avec une différence du spread-skill maximale, à l'échéance 23h (correspondant à 14h UTC), de ~ 0.1 et ~ 0.15 par rapport aux autres méthodes de clustering et le sous-ensemble aléatoire, respectivement. Cependant, la méthode de Ward semble meilleure

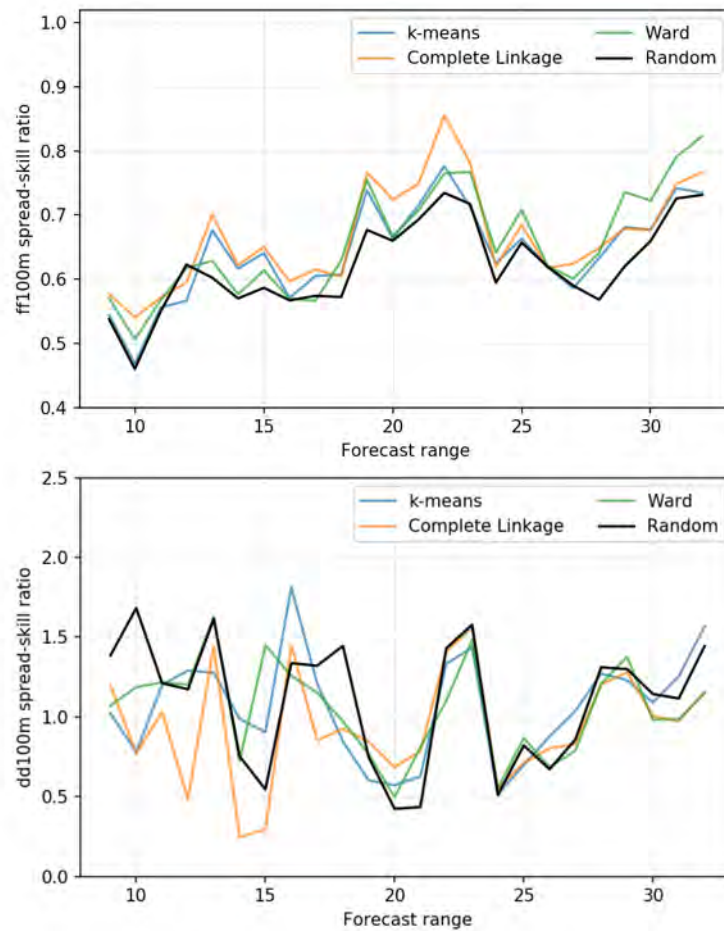


FIGURE 5.3 – Évolution du ratio spread-skill, pour la vitesse (en haut) et direction (en bas) du vent à 100 m, des quatre sous-ensembles en fonction des 24 échéances de prévision ([9–32], réseau 15h UTC) utilisées pour construire les ensembles PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique. Les ratios sont calculés sur la période du 07 au 27 janvier 2021, au point source du ^{85}Kr , superposé au centre du domaine de calcul.

dans les dernières 10 échéances (24–32h). De plus, on constate que dans la dernière moitié de l'intervalle des échéances, la courbe de l'expérience K-means reste constamment en dessous des courbes des méthodes hiérarchiques.

En ce qui concerne la direction du vent, au contraire de la vitesse du vent, on observe qu'il n'y a pas de sous-dispersion systématique et que le spread-skill oscille autour de la valeur 1. Autrement dit, les sous-ensembles sont soit sous-dispersifs ou sur-dispersifs avec des variations assez fortes. Dans la mesure où il n'y a pas de tendance marquée à la sous-dispersion ou à la sur-dispersion, il n'est pas surprenant que les méthodes de clustering aient du mal à apporter une plus-value. La direction du vent est un paramètre très difficile à prévoir et avec une erreur d'observation assez grande (forte sensibilité au terrain).

5.3.2 Diagnostic du CRPS

Le CRPS fournit une mesure intégrale de la qualité des prévisions d'ensemble. La Figure 5.4 compare les CRPS des trois sous-ensembles du clustering par rapport au sous-ensemble aléatoire. Pour la vitesse du vent, on observe que pour la méthode K-means, la différence du CRPS oscille autour de la valeur nulle sans aucune différence significative sauf à l'échéance 18h où le sous-ensemble aléatoire est significativement meilleur que celui du clustering, avec une différence du CRPS de 0.4 m.s^{-1} . Ainsi, généralement parlant, on peut dire que l'impact de la méthode K-means n'est pas significative en terme de CRPS pour la vitesse du vent. Cependant, les méthodes hiérarchiques améliorent le CRPS quasiment à toutes les échéances de prévision, avec des améliorations significatives dans la dernière moitié de l'intervalle des échéances. Vu les résultats du ratio spread-skill, une explication de ce dernier résultat peut être, d'un point de vue météorologique, que les probabilités de prévision d'un champ météorologique sous-dispersif sont généralement améliorées lorsque la dispersion de l'ensemble augmente.

En revanche, en terme de direction du vent, pour les méthodes hiérarchiques on remarque que dans la première moitié de l'intervalle des échéances les différences du CRPS varient autour de la valeur nulle, avec une performance meilleure de la méthode de Ward. Cependant, dans la deuxième moitié des échéances la qualité des sous-ensembles est dégradée. Pour la méthodes K-means, il apparaît que le sous-ensemble aléatoire est, généralement, meilleure que celui du clustering.

En résumé, à partir des deux scores probabilistes du ratio spread-skill et CRPS, on peut conclure que les méthodes du clustering testées sont meilleures pour classifier la vitesse du vent que sa direction. De plus, les méthodes hiérarchiques semblent légèrement meilleures que la méthode K-means.

5.4 Cartes de décision : un outil stratégique pour la gestion des crises nucléaires

L'un des enjeux principaux de cette étude est de synthétiser les résultats scientifiques obtenus, et de les rendre exploitables et lisibles par la communauté non-spécialiste du domaine des sciences de l'atmosphère. Pour cela, on propose de présenter les résultats des simulations de dispersion sous forme de « *cartes de décision* ».

5.4.1 Création des cartes de décision

On appelle carte de décision une simulation en deux dimensions du panache construit par les différents membres de l'ensemble (ou sous-ensemble) de dispersion PEARO-pX à

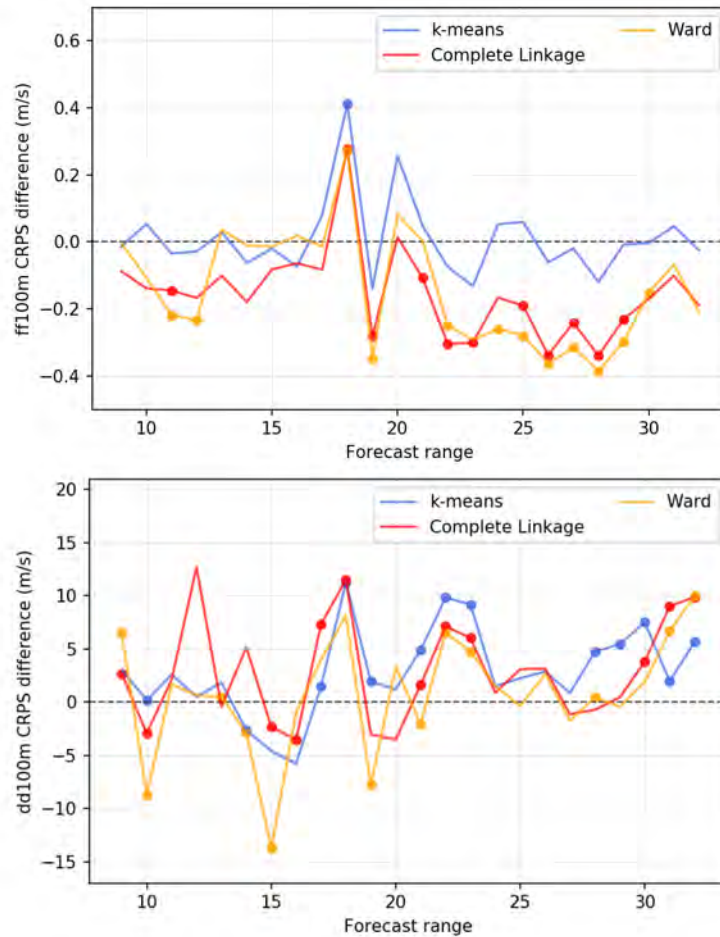


FIGURE 5.4 – Évolution de la différence du CRPS entre chaque sous-ensemble du clustering et le sous ensemble aléatoire, pour la vitesse (en haut) et direction (en bas) du vent à 100 m, en fonction des 24 échéances de prévision ([9–32], réseau 15h UTC) utilisées pour construire les ensembles PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique. Les points indiquent les valeurs qui sont significativement différentes du CRPS du sous-ensemble aléatoire, selon le test de significativité de Wilcoxon. Les valeurs négatives indiquent de meilleurs résultats pour les ensembles issus du clustering.

un instant donné. L'intérêt de ces cartes réside dans le fait qu'elles présentent non seulement les zones de forte probabilité de contamination mais aussi les zones potentiellement exposées au risque (appelées dans la suite les zones de risque). Ces cartes se créent par rapport à un seuil de concentration fixé en amont. Dans la suite de ce chapitre, on reprend le même seuil de concentration du ^{85}Kr dans l'air que celui utilisé dans les chapitres précédents (1545 Bq.m^{-3}), et on rappelle que le domaine de calcul se compose de 24×24 points de grille, espacés de 2.5 km.

La procédure de création des cartes de décision se divise en deux étapes :

- Détermination des zones de risque. Pour déterminer ces zones, on définit dans un premier temps une zone par l'ensemble des points de grille pour lesquels au moins un membre de l'ensemble (ou sous-ensemble) prévoit un dépassement de seuil de concentration du ^{85}Kr . Ensuite, cette zone est étendue en utilisant la plus petite surface convexe qui entoure les membres du sous-ensemble (Figure 5.5). Ainsi, pour chaque ensemble on associe une zone de risque qui représentera par la suite le paramètre d'évaluation des sous-ensembles vis-à-vis de l'ensemble complet.
- Calcul des probabilités de dépassement de seuil de concentration (Figure 5.5-b). Pour chaque point de grille du domaine, on calcule une probabilité totale qui correspond à la somme des probabilités partielles accordées à chacun des membres qui prévoient un dépassement de seuil dans cette maille. On distingue trois cas : (i) le premier cas est celui de l'ensemble complet PEARO-pX où les membres sont équiprobables, et chacun d'eux a une probabilité partielle égale à $1/16$. (ii) Le deuxième cas est celui des sous-ensembles issus de clustering, où le nombre de membres contenus dans un cluster prédéfinit la probabilité associée à son membre représentatif. Autrement dit, si un cluster contient n membres alors la probabilité accordée au membre représentatif de ce cluster sera égale à $n/16$. Enfin, (iii) le troisième cas est celui du sous-ensemble aléatoire où les membres sont considérés équiprobables chacun ayant une probabilité égale à $K/16$, soit dans notre cas $4/16$.

5.4.2 Stratégie d'évaluation des cartes de décision

L'objectif de l'évaluation des cartes de décision est de quantifier la capacité du clustering à sélectionner un nombre de membres PEARO réduit, tout en permettant de détecter les zones à risque au plus proche de ce qui serait fait avec l'utilisation de l'ensemble PEARO complet. On utilise le score FMS (de l'anglais Figure of Merit in Space) qui permet de mesurer le degré de recouvrement spatial (ainsi que de ressemblance) des zones de risque des sous-ensembles par rapport à celle de l'ensemble complet, en calculant le rapport entre leur intersection et leur union (Figure 5.6) à un instant donné. Le score FMS est exprimé en pourcentage, et un sous-ensemble parfait aura un $\text{FMS} = 100\%$:

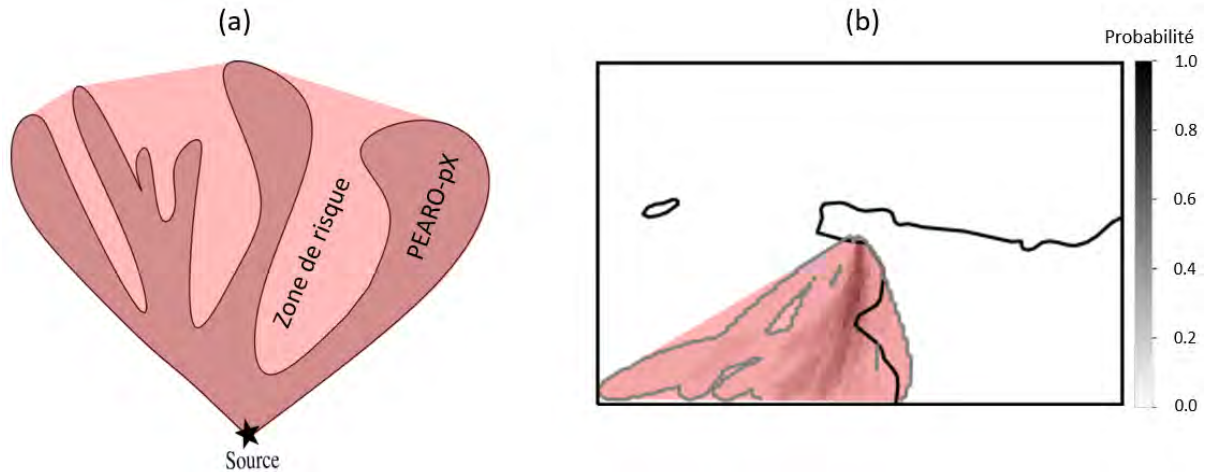


FIGURE 5.5 – (a) : Délimitation de la zone à risque (en rouge) à partir de l'ensemble PEARO-pX (en gris). (b) : Exemple d'une carte de décision dans la zone d'étude (situation du 10/01/2021 à 07h UTC). La zone à risque est représentée en rouge. Les membres PEARO-pX sont délimités par le contour gris. Les probabilités de dépassement de seuil aux points de grille sont représentées par les niveaux de gris.

$$FMS = \frac{\mathcal{A} \cap \mathcal{B}}{\mathcal{A} \cup \mathcal{B}} \quad (5.9)$$

Où \mathcal{A} et \mathcal{B} représentent, respectivement, les zones de risque de l'ensemble complet et du sous-ensemble évalué.

Ainsi, le calcul des séries temporelles de l'évolution du FMS pour chaque sous-ensemble permettra à la fois d'évaluer la performance de chaque méthode de clustering par rapport à l'ensemble complet, et de mettre en évidence l'apport des algorithmes de clustering par rapport à une sélection aléatoire des membres PEARO utilisés pour le calcul de la dispersion atmosphérique.

5.5 Évaluation des cartes de décision

Dans la section 5.3, nous avons évalué la qualité des prévisions météorologiques d'ensemble construites par les algorithmes de classification. Ces ensembles réduits ont été, en effet, comparés à un ensemble réduit construit par prélèvement aléatoire de quatre membres PEARO. Dans ce chapitre, les quatre sous-ensembles sont utilisés à l'entrée du modèle de dispersion pX afin de générer une chronologie de cartes de décision au long de la période d'étude. Ces cartes sont ensuite évaluées à l'aide du score FMS.

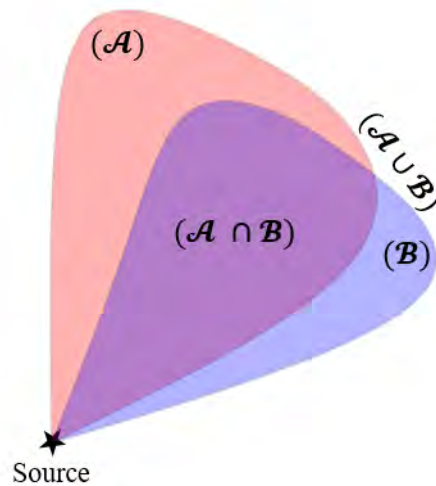


FIGURE 5.6 – Illustration du calcul du FMS d'un sous-ensemble donné. La zone de risque de l'ensemble complet PEARO-pX est représentée en rouge (\mathcal{A}), alors que celle associée au sous-ensemble est représentée en bleu (\mathcal{B}).

5.5.1 Sensibilité à la variable prédictive

Comme évoqué dans la section (5.2.3), les deux variables d'intérêt pour classifier les membres PEARO sont soit le vent, avec ses deux coordonnées zonale (U) et méridionale (V), ou bien le vent combiné au gradient de température à 100 m (∇T). La Figure 5.7 compare la pertinence des cartes de décision générées, à partir des sous-ensembles météorologiques issus des algorithmes de clustering, en considérant les deux alternatives de variables prédictives. En premier, ce résultat met en avant la pertinence, en moyenne, des algorithmes du clustering, comparés au sous-échantillonnage aléatoire, dans la détection des territoires exposés au risque de contamination, quelle que soit la variable prédictive appliquée. Toutefois, on trouve que la détection des zones de risque est légèrement améliorée dans la configuration utilisant le vent seul comme variable prédictive, avec un FMS moyen autour de 50%. Cette préférence légère est traduite par un abaissement de l'écart entre le FMS moyen des méthodes de clustering et celui du sous-échantillonnage aléatoire, qui va de $\sim 8\%$ en utilisant le vent seul à $\sim 4\%$ en y ajoutant le gradient de température. Cela peut être expliqué par les effets locaux de la zone d'étude qui sont à l'origine de l'existence de vent en permanence (Figure 5.10), ce qui ajoute une prédominance du vent face aux effets thermiques. Par conséquent, dans un contexte opérationnel on peut se contenter d'utiliser uniquement les champs du vent pour partitionner les membres PEARO.

Malgré la performance constatée des techniques de clustering, les barres d'incertitude (Figure 5.7) indiquent une variabilité importante de la pertinence des classifications au cours du temps. Pour explorer davantage ce comportement, la Figure 5.8 présente les séries temporelles de la différence du FMS, de chaque méthode de clustering vis-à-vis de

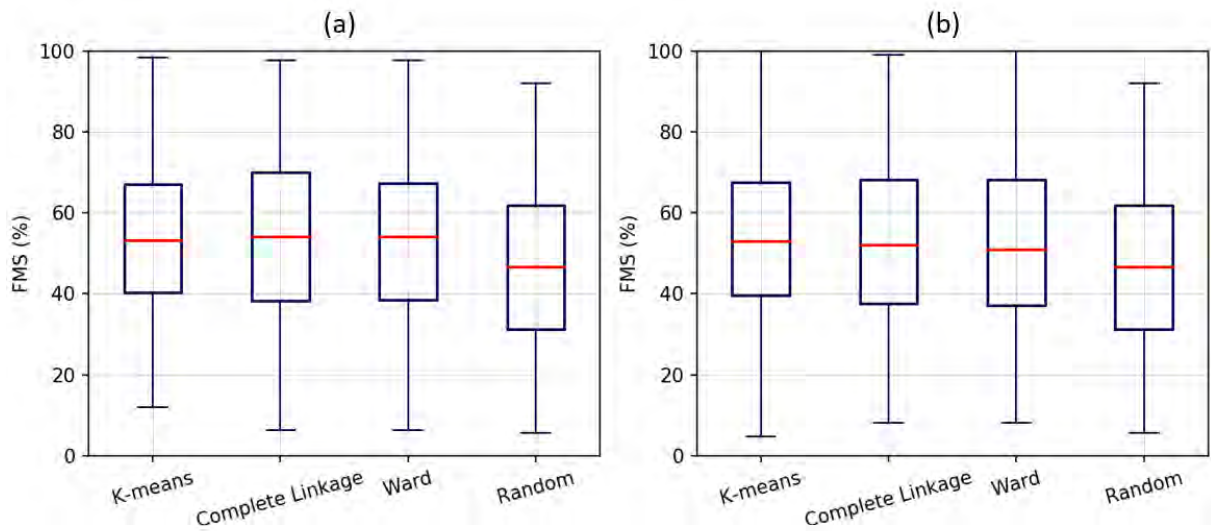


FIGURE 5.7 – Boîtes à moustaches représentant les distributions du FMS calculé sur les zones de risque associées à chacun des quatre sous-ensembles testés dans ce chapitre, en considérant le champ du vent seul comme variable prédictive du clustering (a) et le vent combiné au gradient de température à 100 m (b). Le FMS est calculé dans la période 07–27/01/2021.

la méthode de référence. Bien que les méthodes de clustering soient meilleures que la référence pour la plupart des instants, on observe toutefois qu'un simple sous-échantillonnage aléatoire peut obtenir de meilleurs résultats dans un nombre de cas non négligeable. Cela peut être expliqué par la représentativité temporelle du clustering dans la zone d'étude. En effet, l'affectation du résultat du clustering, appliqué sur les données du vent d'un jour entier, à toutes les heures du jour peut être une source d'erreur notable à cause de la grande variabilité du vent dans la zone d'étude (Figure 5.10). Ainsi, l'affinement de la fréquence d'application du clustering pourrait peut-être améliorer la capacité des méthodes de clustering à sélectionner les scénarios météorologiques les plus pertinents pour la dispersion atmosphérique, mais avec un coût de calcul qui augmente linéairement avec la fréquence d'application du clustering. Dans ce manuscrit, un clustering à fréquence plus élevé n'a pas été retenu car l'objectif essentiel est d'examiner l'apport des techniques de classification, en gardant un coût de calcul léger afin de permettre de réaliser un grand nombre d'expériences.

5.5.2 Sensibilité aux conditions du vent

En météorologie, un vent faible est le plus souvent corrélé à une forte incertitude quant à sa direction. En conséquence, l'incertitude des simulations de la dispersion atmo-

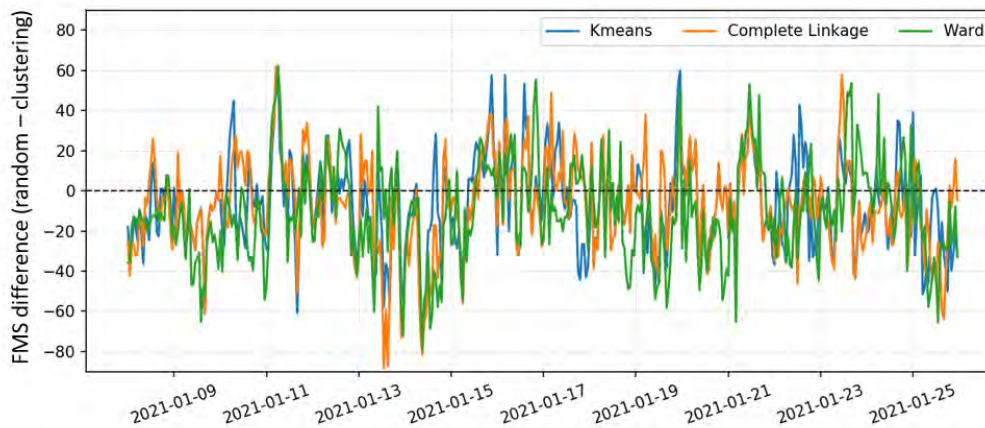


FIGURE 5.8 – Évolution temporelle de la différence du FMS entre chacun des trois sous-ensembles du clustering et le sous-ensemble aléatoire. Les valeurs négatives indiquent une meilleure performance du clustering. La ligne horizontale en pointillé indique la valeur de la différence nulle, où le FMS du sous-ensemble aléatoire est égale à celui du clustering.

sphérique en conditions du vent faible augmente. Cette incertitude est traduite dans la réalité par une différence importante des scénarios de dispersion. Autrement dit, dans les conditions du vent faible, les membres de la prévision d'ensemble dispersent le panache selon des directions très différentes, produisant des zones de risque plus larges. Cet effet des conditions du vent sur l'incertitude de l'ensemble de la dispersion est illustré dans la Figure 5.9, qui montre l'existence d'une corrélation négative entre la largeur des zones de risque (associée à l'ensemble complet) et la vitesse du vent, avec un coefficient de détermination $R^2 = 0.42$. Ici on comprend que la largeur de la zone du risque est liée directement à la force du vent, et que l'incertitude de la prévision augmente en conditions du vent faible. Il est aussi intéressant de noter que la dispersion du panache peut être également liée au terme source (données confidentielles dans le cadre de ces travaux de thèse). Autrement dit, lorsque de faibles quantités sont rejetées du ^{85}Kr , le panache peut ne pas être très dispersé dans l'espace même en cas de situations du vent faible. Cela explique certaines situations de vent faible avec des zones de risque peu étendues sur la Figure 5.9.

Afin de comprendre l'effet de la variation du vent sur la pertinence des cartes de décision, on définit de façon indicative et objective, à partir des figures 5.9 et 5.10, trois classes de vent (Tableau 5.3 et Figure 5.10) : (i) $[0, 7 \text{ m.s}^{-1}]$ représentant les conditions du vent faible, (ii) $]7, 12 \text{ m.s}^{-1}]$ pour les conditions du vent modéré et (iii) $]12, +\infty \text{ m.s}^{-1}]$ pour les cas du vent fort. Ensuite, dans chacune de ces trois conditions de vent on calcule le score FMS aux instants correspondants (Figure 5.11). Comme attendu, le résultat montre une amélioration importante du FMS moyen dans les cas du vent fort par rapport aux cas du vent faible et modéré. En outre, l'écart entre le FMS moyen des méthodes de clustering

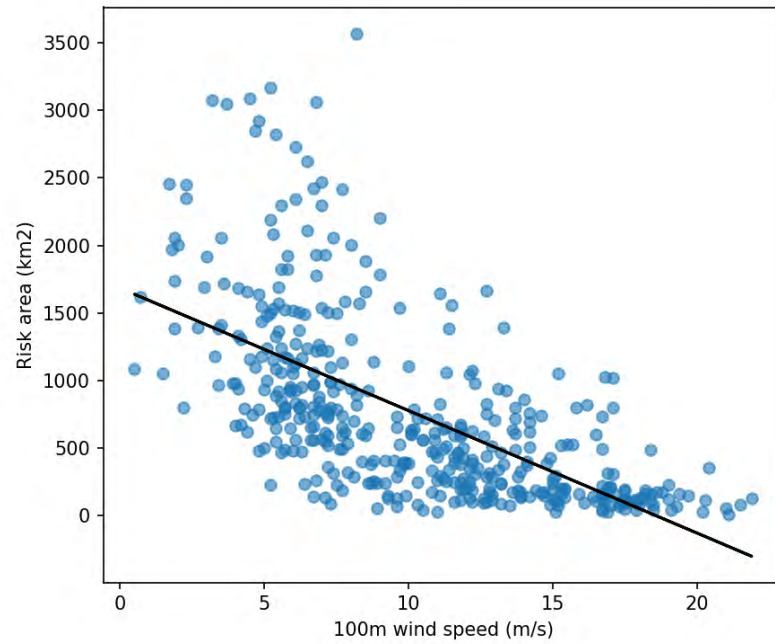


FIGURE 5.9 – Surface des zones de risque de l’ensemble PEARO-pX en fonction de la vitesse vent à 100 m à la station Orano, dans la période d’étude (07–27/01/2021). La ligne noire représente la droite de régression linéaire, ayant un coefficient de détermination $R^2 = 0.42$.

Conditions du vent	Intervalle des valeurs ($m.s^{-1}$)	Nombre de cas
Vent faible	$[0, 7[$	136
Vent modéré	$[7, 12[$	153
Vent fort	$[12, +\infty[$	143

TABLE 5.3 – Intervalles du vent définis pour étudier la sensibilité de la pertinence des cartes de décision aux conditions du vent, et le nombre de cas de chaque situation au cours de la période d’étude

et celui du sous-échantillonnage aléatoire et plus marqué dans les situations du vent faible et modéré que dans les situations du vent fort, ce qui veut dire que l’utilisation des algorithmes de classification, pour sélectionner les membres météorologiques pertinents pour le calcul de la dispersion, est plus intéressant en périodes du vent faible qu’en cas de vent fort.

Pour illustrer ces résultats, les Figures 5.12, 5.13 et 5.14 montrent, respectivement, trois exemples de cartes de décision en situations de vent faible ($4.8 m.s^{-1}$), de vent modéré ($8.5 m.s^{-1}$) et de vent fort ($18.3 m.s^{-1}$). Ces cartes de décision montrent l’intérêt important du clustering, par rapport au sous-échantillonnage aléatoire, dans le cas d’un panache dispersé dans l’espace. Dans le cas d’un vent faible ou modéré, on trouve que le panache est suffisamment dispersé dans l’espace, pour que les méthodes de clustering

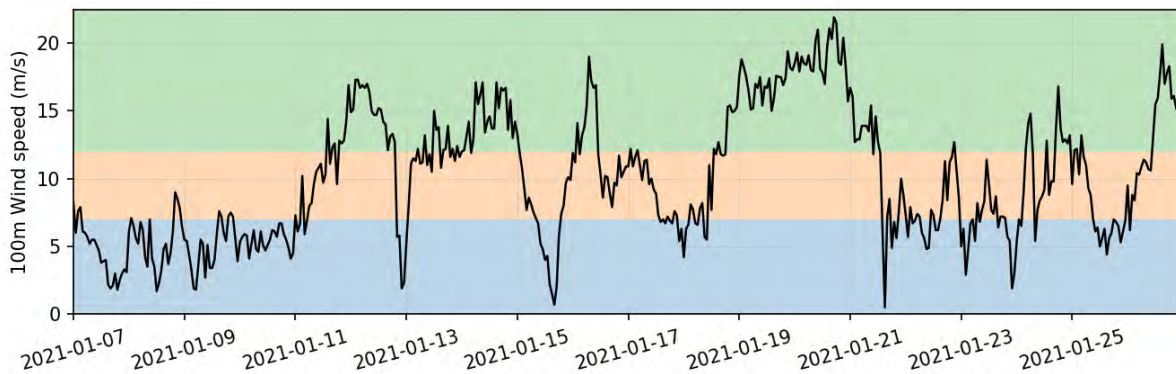


FIGURE 5.10 – Série temporelle des observations ultrasoniques du vent à 100 m mesuré par Sodar dans la station Orano, située au centre du domaine de calcul de la dispersion atmosphérique. Les couleurs indiquent les trois intervalles de la vitesse du vent (en $m.s^{-1}$) testés : $[0, 7]$, $]7, 12]$ et $]12, +\infty[$.

réussissent à sélectionner un ensemble PEARO réduit permettant d'obtenir des zones de risque très proches de l'ensemble complet, avec des valeurs très élevées du score FMS (sauf pour la méthode de Ward dans le cas du vent modéré). Dans ces cas, l'approche aléatoire n'est pas en mesure de capturer la variabilité au sein de l'ensemble complet. Par contre, dans le cas d'un vent fort, on observe que le panache est très peu dispersé. Par conséquent, on obtient presque le même résultat entre méthodes de clustering et sous-ensemble aléatoire (FMS=82.9% pour le clustering et FMS=81.3% pour l'aléatoire). Cela confirme que, globalement, l'utilisation de l'approche aléatoire dans une telle situation, pour sélectionner les membres météorologiques dédiés à la dispersion atmosphérique, est largement suffisante. Ainsi, ces résultats nous conduisent à proposer deux approches à adapter dans le processus de la gestion de crises nucléaires : (i) la première approche consiste à automatiser le système de classification des membres PEARO, de telle sorte que l'utilisation d'un algorithme de clustering ne soit faite que lorsque le vent est au-dessous d'un seuil (à fixer), et qu'un sous-échantillonnage aléatoire soit utilisé si le seuil est dépassé. Ce seuil dépendra des particularités géographiques de la zone d'intérêt et du terme source. (ii) La deuxième approche, quant à elle, consiste en l'utilisation des algorithmes de clustering en permanence, sous condition de réduire davantage le nombre de membres dans les cas où le panache est susceptible d'être peu dispersé dans l'espace (sous conditions du vent et du terme source). Ces deux approches sont censées minimiser le coût de calcul de la dispersion, sans dégrader la pertinence du clustering.

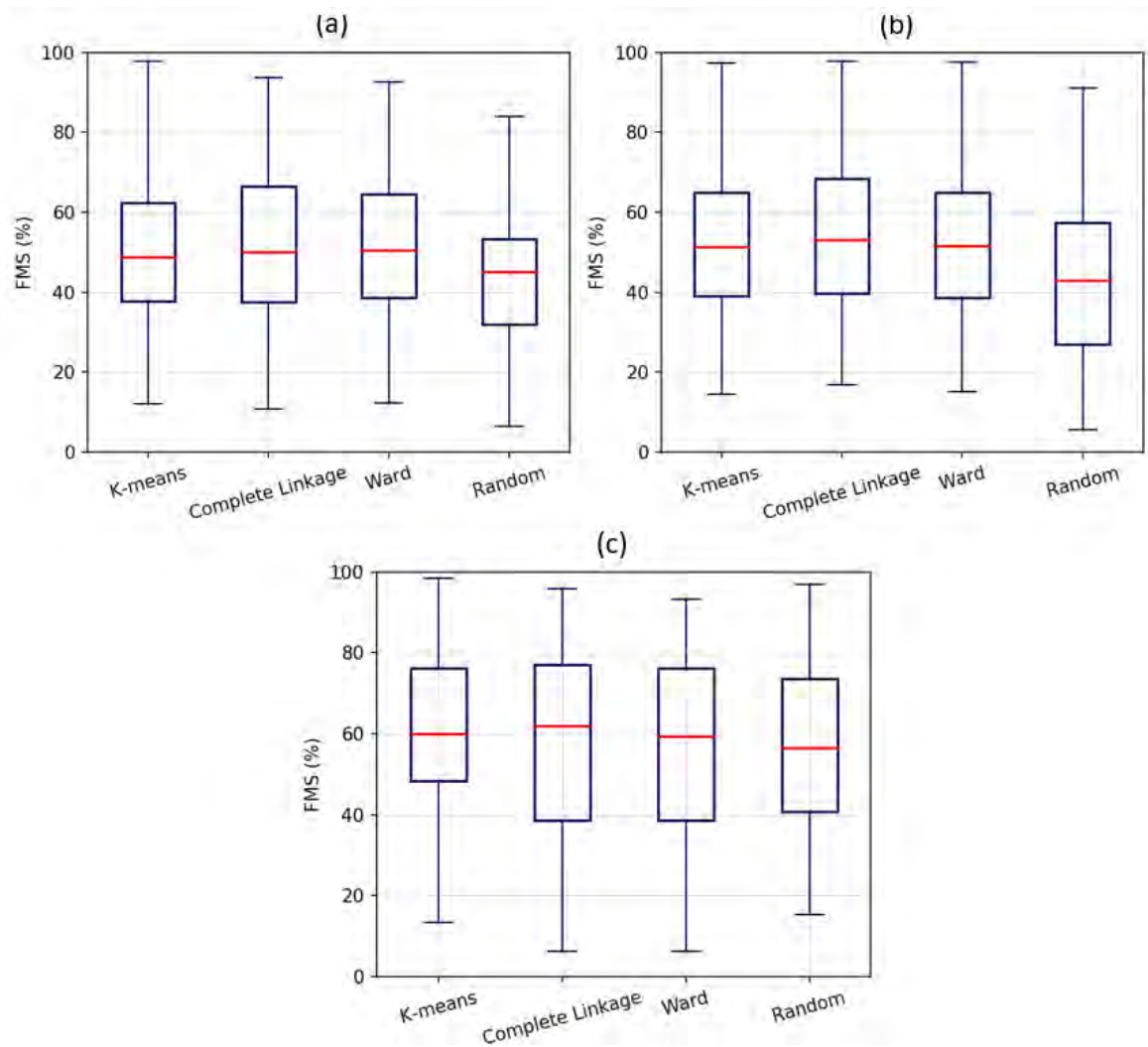


FIGURE 5.11 – Boîtes à moustaches représentant les distributions du FMS calculé par rapport aux zones de risque associées à chacun des quatre sous-ensembles testés dans ce chapitre, pour les conditions du vent : vent faible (a), vent modéré (b) et vent fort (c).

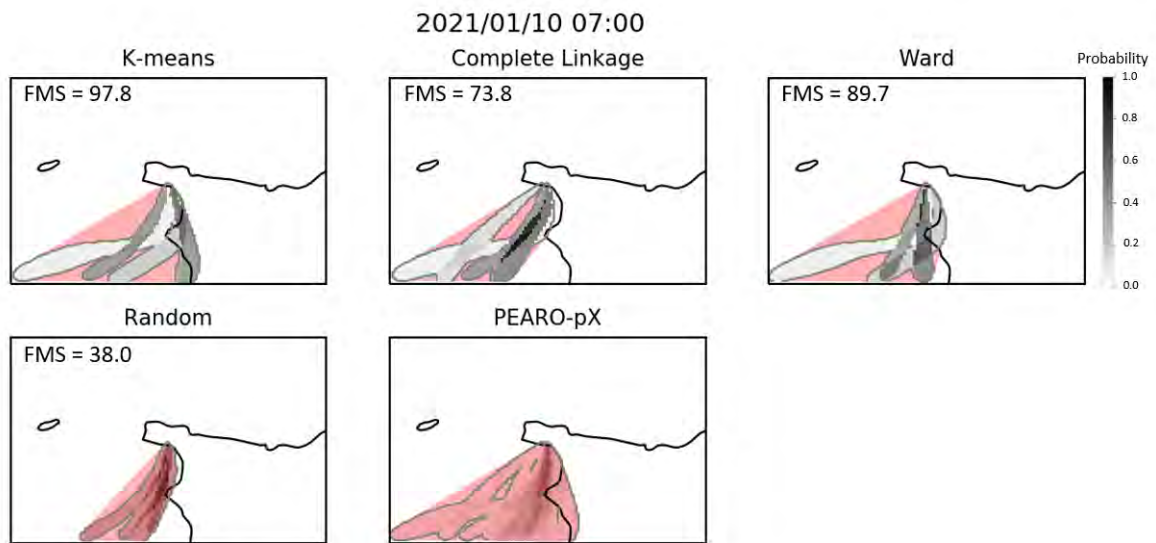


FIGURE 5.12 – Cartes de décisions des quatre sous-ensembles réduits ainsi que l'ensemble complet PEARO-pX, dans la situation du 07/01/2021 à 07h (UTC) où la vitesse du vent à 100 m, mesurée à point source, est égale à 4.8 m.s^{-1} (vent faible). Les aires rouges représentent les zones de risque tandis que les probabilités de dépassement de seuil de concentration du ^{85}Kr sont représentées par les niveaux de gris.

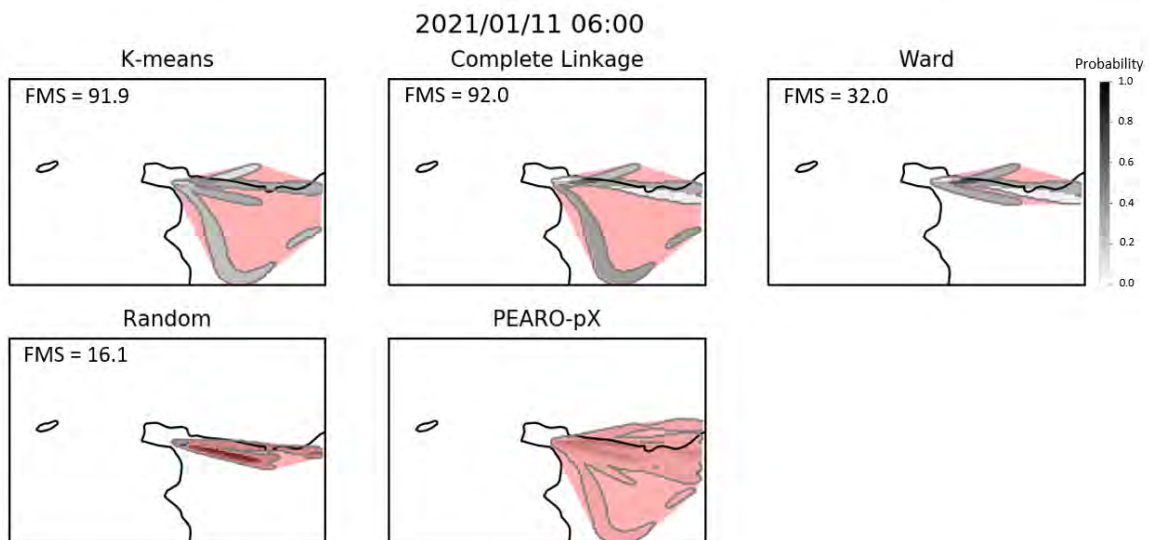


FIGURE 5.13 – Même chose que la Figure 5.12, mais pour la situation du 11/01/2021 à 06h (UTC) où le vent à 100 m, mesuré au point source est égale à 8.5 m.s^{-1} (vent modéré).

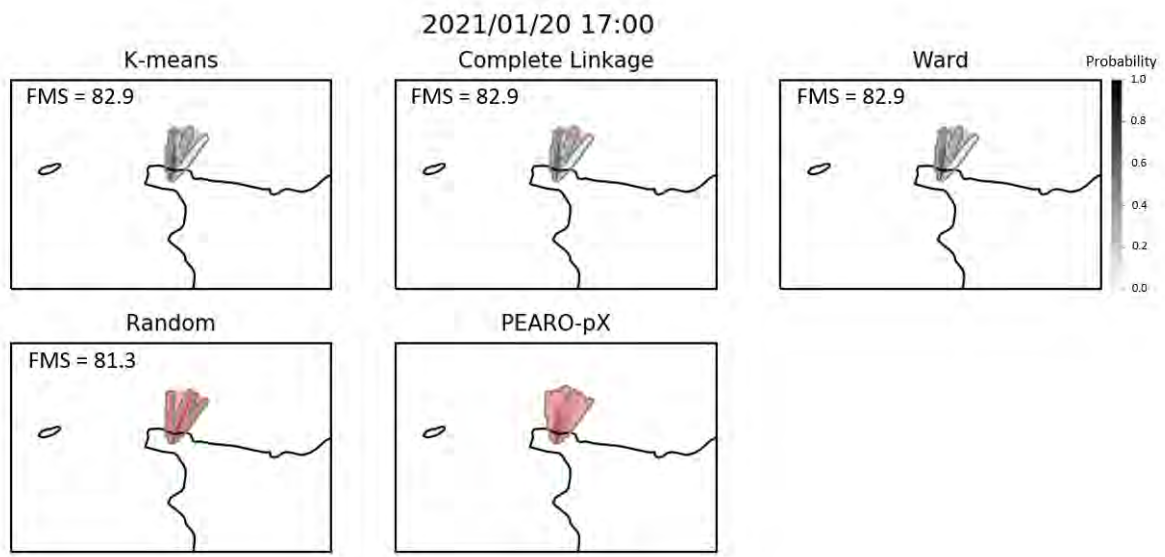


FIGURE 5.14 – Même chose que la Figure 5.12, mais pour la situation du 20/01/2021 à 17h (UTC) où le vent à 100 m, mesuré au point source est égale à 18.3 m.s^{-1} (vent fort).

5.6 Évaluation des sous-ensembles de la dispersion par rapport aux observations radiologiques du ^{85}Kr

Dans le paragraphe précédent, l'impact des algorithmes de clustering sur les simulations de la dispersion en 2D a été évalué par rapport à l'ensemble complet, qui a été supposé comme une simulation parfaite. La meilleure classification était donc celle qui fournit un sous-ensemble le plus proche de l'ensemble complet. Cette démarche permet de quantifier à quel point un algorithme de clustering est capable de capter une grande partie de la variabilité d'un ensemble météorologique, et la capacité d'un sous-ensemble à représenter au mieux l'incertitude de l'ensemble complet avec un coût de calcul optimal. Par contre, la performance des sous-ensembles par rapport à la réalité n'a pas été évaluée. Pour valider les résultats précédents, il est donc indispensable de les compléter par une évaluation par rapport aux mesures radiologiques du ^{85}Kr .

Pour ce faire, nous suivons la méthodologie d'évaluation adoptée dans les deux chapitres précédents, utilisant les deux scores probabilistes basés sur des tables de contingence : courbes ROC et score PSS, en supposant que l'hypothèse de l'équiprobabilité des membres est valable autant pour les sous-ensembles du clustering que pour le sous-ensemble aléatoire et l'ensemble complet. Les sous-ensembles météorologiques construits par clustering sont utilisés cette fois pour calculer la dispersion atmosphérique dans les

huit stations DISKRYNOC. Le temps de calcul de la dispersion étant très faible dans ce cas (le calcul est fait sur 8 points au lieu de 24×24 points), il a été possible de générer un échantillon de 1000 sous-ensembles aléatoires qui sera comparé aux sous-ensembles du clustering. Enfin, après avoir agrégé toutes les données de prévisions et d'observations dans les points de mesures, on calcule les scores à l'aide de la méthode de *discrétisation temporelle par intervalle glissant* développée dans le Chapitre 3.

Les résultats de cette évaluation, comme le montre la Figure 5.15, indiquent une bonne performance des sous-ensembles de clustering comparés à la simulation déterministe, avec des PSS optimaux de 0.6 et 0.69 pour, respectivement, les méthodes hiérarchiques et K-means, qui dépassent largement le PSS déterministe qui vaut 0.55. Ce résultat confirme de nouveau l'intérêt de la modélisation probabiliste, par rapport à l'approche déterministe, même lorsqu'on utilise des ensembles de taille réduite.

De plus, malgré les sources d'erreurs qui interviennent dans le calcul des sous-ensembles classifiés et qui sont liées principalement aux approximations de configuration des algorithmes, on trouve que ces sous-ensembles permettent bien de s'approcher des performances de l'ensemble complet. On note que, pour les ensembles issus du clustering, les meilleurs scores sont obtenus par la méthode de K-means.

Enfin, si on compare les performances des méthodes de clustering à celles de l'échantillonnage aléatoire, on retrouve le fait qu'un sous-ensemble aléatoire peut, dans certaines situations, être de qualité équivalente ou supérieure à un sous-ensemble du clustering.

5.7 Résumé des principaux résultats

Ce chapitre examine la possibilité de réduire la taille des ensembles météorologiques de la PEARO, afin de diminuer le temps de calcul de la dispersion atmosphérique dans le cas d'un accident nucléaire. Pour ce faire, trois méthodes de classification non-supervisée sont testées et comparées avec un sous-ensemble aléatoire composé en choisissant au hasard un nombre de membres parmi les 16 membres PEARO.

Dans un premier temps, la configuration des algorithmes de clustering a été détaillée pour fixer les bons paramètres permettant d'assurer leur convergence, avec un coût de calcul optimal. Ainsi, le nombre de clusters retenu est 4, et la métrique choisie pour calculer la similarité entre les membres PEARO est la distance moyenne quadratique point-par-point. Par ailleurs, il a été démontré que le vent à 100 m est la meilleure variable prédictive à utiliser pour le calcul du clustering. Afin de construire les sous-ensembles du clustering, on choisit un membre représentatif par cluster, à l'aide d'un indice de représentativité défini.

L'évaluation, par rapport à un sous-échantillonnage aléatoire, des sous-ensembles mé-

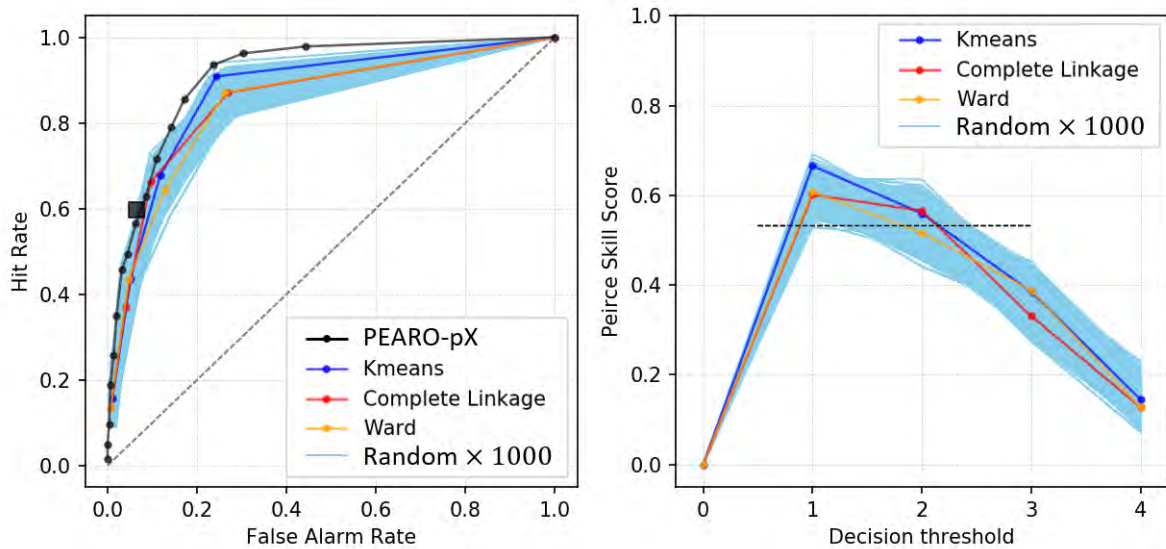


FIGURE 5.15 – Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) pour les 3 sous-ensembles du clustering et 1000 sous-ensembles aléatoires (panache en cyan). Pour les courbes ROC on ajoute celle de l'ensemble complet PEARO-pX (courbe noire). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par un carré dans les courbes ROC et par une lignes horizontale en pointillé dans le score PSS.

téorologiques construits, a montré, en terme de vent, que les algorithmes de clustering permettent d'améliorer significativement la qualité des sous-ensembles pour la vitesse du vent, tandis que pour la direction du vent le clustering n'a pas d'impact systématique. Les méthodes hiérarchiques ont présentées une performance légèrement meilleure par rapport à la méthode K-means.

Les résultats de la dispersion atmosphérique ont été présentés sous-forme de « cartes de décision », qui ont l'avantage de montrer à la fois les zones de forte probabilité de contamination mais également l'ensemble des zones exposées à un risque de contamination. L'évaluation de ces cartes, par rapport à l'ensemble complet PEARO, a été faite à l'aide du score FMS. Cette évaluation a montré que les méthodes de clustering peuvent générer des sous-ensembles qui représentent une grande partie de l'incertitude de l'ensemble PEARO complet. De plus, des tests de sensibilité aux conditions du vent ont montré que le clustering a plus d'intérêt dans les situations de vent faible que dans les cas de vent fort. À la lumière de ce résultats, deux solutions ont été proposées pour une meilleure gestion des situations d'accidents nucléaires : (i) l'utilisation du clustering uniquement dans les situations du vent faible et l'utilisation d'un sous-échantillonnage aléatoire sinon, ou (ii) l'utilisation du clustering dans toutes les situations mais avec moins de membres dans les cas de vent fort.

Enfin, les sous-ensembles de la dispersion ont été évalués par rapport aux observations radiologiques du ^{85}Kr dans les huit stations DISKRYNOC installées autour de l'usine Orano La Hague. Les résultats de cette évaluation ont confirmé la capacité du clustering a représenter une grande partie de l'incertitude météorologique de l'ensemble PEARO, avec une préférence légère pour la méthode K-means comparée aux méthodes hiérarchiques.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Synthèse du contexte de la thèse

La prévision de la dispersion atmosphérique des polluants rejetés dépend fortement de la prévision des conditions météorologiques, auxquelles peuvent être associées des incertitudes significatives. Lors d'un accident nucléaire, l'appui de la gestion de crise nécessite d'avoir la prévision la plus fiable possible de la dispersion des radionucléides rejetés. L'objectif principal de ces travaux de thèse était d'évaluer l'apport de l'approche de la modélisation d'ensemble pour caractériser et prendre en compte la propagation des incertitudes météorologiques dans les modèles de dispersion atmosphérique à courte distance. Pour ce faire, une chaîne de modélisation d'ensemble de la dispersion, PEARO-pX, a été développée et optimisée, en couplant les prévisions météorologiques d'ensemble à fine-échelle PEARO, de Météo-France, au modèle pX, utilisé en situation d'urgence radiologique au Centre Technique de Crise de l'IRSN.

Ces travaux ont été menés autour de l'usine Orano La Hague, qui se trouve dans la pointe de La Hague au Nord-Cotentin (Nord-Ouest de France). Lors du procédé de retraitement des combustibles nucléaires usés, l'usine Orano La Hague effectue des rejets réguliers de l'isotope du ^{85}Kr , qui peut être utilisé comme traceur de la dispersion atmosphérique à courte et moyenne distances (jusqu'à quelques dizaines de kilomètres), grâce à son inertie chimique (dépôt négligeable) et sa période radioactive suffisamment longue pour que sa décroissance radioactive soit négligeable. Les données du rejets du ^{85}Kr , fournies par l'usine Orano avec une bonne précision, ont été utilisées comme terme source en entrée du modèle pX. Par ailleurs, dans le cadre de la campagne de mesure DISKRYNOC, réalisée par le Laboratoire de Radioécologie de Cherbourg de l'IRSN, des mesures continues de l'activité volumique du ^{85}Kr dans l'air ont été acquises dans une dizaine de stations autour du point source, de mi-novembre 2020 jusqu'en décembre 2022. En plus de cette base de données radiologiques, plusieurs sites d'observations météorolo-

giques, de Météo-France et de l'IRSN, sont disponibles dans le Nord-Cotentin. Pour toutes ces raisons, cette zone présente un environnement propice pour l'étude de la dispersion atmosphérique des radionucléides à échelle locale.

Dans la mesure où la zone d'étude est une zone rocheuse à orographie complexe, il a été nécessaire, avant de mettre en place la chaîne de modélisation PEARO-pX, de réaliser une étude préliminaire de validation des ensembles de la PEARO dans cette zone. Dans ce but, une filière de scores pertinents (biais, ratio spread-skill, diagrammes de rang, CRPS) a été développée en confrontant les prévisions de la PEARO aux mesures météorologiques in-situ des champs 3D du vent (vitesse et direction), sur une période de trois mois (Décembre 2020 – Février 2021), dans les sites d'observations de Météo-France et de l'IRSN disponibles dans la zone d'étude. À l'issue de cette étape d'évaluation, il a été constaté que les ensembles de la PEARO sont de bonne qualité, malgré les erreurs systématiques légères qui ont été identifiées, notamment pour la force du vent.

Réponse à la problématique de la thèse

L'ensemble des résultats obtenus dans ces travaux fournit des éléments de réponse aux quatre questions, soulevées au Paragraphe (1.10), que nous rappelons :

Q1 : Quel est l'apport de la prévision d'ensemble à fine-échelle dans le processus de la prévision de la dispersion atmosphérique à courte distance des radionucléides en cas d'accidents nucléaires ?

L'approche de modélisation d'ensemble de la dispersion atmosphérique présente l'avantage de fournir une information probabiliste, en tenant compte des évolutions possible de l'état de l'atmosphère. Pour mettre en avant l'intérêt de cette approche, la performance statistique des simulations d'ensemble de la dispersion atmosphérique PEARO-pX a été évaluée et comparée avec une simulation déterministe, générée en utilisant la prévision du modèle AROME déterministe en entrée du modèle pX. Pour ce faire, nous avons utilisé deux scores probabilistes pertinents, calculés en fonction des observations radiologiques de l'activité volumique du ^{85}Kr (campagne DISKRYNOC) : les courbes ROC et le score PSS. Les résultats ont montré que les simulations probabilistes ont une meilleure capacité de détection de dépassements de seuil de concentration du ^{85}Kr que la simulation déterministe. En cas de rejets accidentels de radionucléides dans l'atmosphère, ces ensembles de la dispersion peuvent être utilisés pour appuyer la prise de décision, en s'appuyant sur un seuil de décision optimal. Celui-ci est défini comme le nombre de membres dépassant un seuil de dose réglementaire à partir duquel il sera pertinent de recommander des actions de protection de la population. Dans le cas étudié dans ces travaux de thèse, un seuil optimal de 3 membres a été obtenu, et qui peut être adapté en fonction de la sensibilité

de l'utilisateur au taux de détection et aux fausses alarmes. En revanche, ce cas d'étude présente plusieurs particularités liées principalement à la nature de la zone d'étude et de l'isotope du ^{85}Kr utilisé comme traceur dans ces travaux.

A l'issue de ce travail d'évaluation, il nous semble intéressant de souligner l'apport du jeu de données complet et original utilisé. La combinaison d'un terme source précis et des observations radiologiques continues sur une période prolongée (~ 2 ans) a permis d'acquérir un nombre important d'observations, ce qui assure une évaluation des simulations statistiquement robuste et fiable.

Q2 : Quelle est la meilleure façon de joindre plusieurs ensembles météorologiques, couvrant des échéances différentes, afin d'assurer une continuité temporelle des prévisions de la dispersion sur une longue durée en cas d'accidents nucléaires ?

Dans un contexte accidentel, il est intéressant d'évaluer la dispersion des radionucléides sur une longue période à partir du moment de rejet. Cela nécessite d'alimenter les modèles de dispersion par des prévisions météorologiques continues, qui couvrent toute la période du rejet, typiquement de l'ordre d'un mois. La solution est alors de construire un forçage météorologique à partir de plusieurs prévisions. Ainsi, l'enjeu est de combiner plusieurs prévisions (issues d'initialisations différentes) pour construire une prévision météorologique couvrant une longue période, et qui peut être utilisée dans un contexte accidentel, en prenant en compte les contraintes du temps de disponibilité des prévisions (calcul, traitement et transfert). Pour ce faire, deux configurations ont été développées : (i) la première s'appuie sur le principe d'utiliser un seul réseau de prévisions, qui est disponible au début d'un jour (à 00 h UTC) et qui est le plus récent. Dans le cas de la PEARO, la prévision lancée à 15 h UTC de la veille est utilisée pour couvrir le jour en cours. Pour AROME déterministe, le même principe conduit à l'utilisation de la prévision lancée à 12 h UTC. (ii) La deuxième s'appuie sur le principe d'utiliser les prévisions météorologiques les plus récentes, issues des quatre réseaux de prévisions (de la PEARO et AROME) au lieu d'un seul, en effectuant un changement de réseau toutes les six heures. Ainsi, deux ensembles de la dispersion PEARO-pX, ainsi que deux simulations déterministes AROME-pX, ont été réalisées à partir de ces deux configurations. Les résultats de l'évaluation de ces simulations sont similaires pour l'ensemble, avec une meilleure performance en utilisant de la première configuration pour les simulations déterministes.

Par ailleurs, la jointure des prévisions différentes peut induire des discontinuités non-physiques dans les prévisions météorologiques construites. Ainsi, nous avons montré qu'il est possible de construire des ensembles météorologiques sans couture, où les sauts de jointure sont minimisés, en utilisant l'algorithme d'affectation de Kuhn-Munkres. Cependant,

cela n'apporte pas d'effet sur les résultats de la dispersion atmosphérique, par rapport à la jointure aléatoire.

Q3 : Quelle est la meilleure configuration des modèles de dispersion gaussiens pour la prévisions des dépassements de seuil de concentration des radionucléides dans l'air ?

Pour répondre à cette question, deux configurations ont été comparées, utilisant les deux paramétrisations des écarts-types gaussiens de Pasquill et de Doury. Une étude de sensibilité des simulations de la dispersion, pour les deux paramétrisations, aux paramètres atmosphériques (vent gradient de température, HCLA, stabilité) a été réalisée. Les meilleures résultats ont été obtenue en utilisant les lois des écarts-types gaussiens de Pasquill.

Q4 : Comment peut-on réduire le coût de calcul associer à l'utilisation des ensembles à fine-échelle (transfert et post-traitement météorologique et calcul de la dispersion) en cas de situations d'urgences nucléaires ?

Pour cette question, nous avons exploré la possibilité de réduire la taille des ensembles météorologiques, tout en préservant leur capacité à représenter les incertitudes météorologiques. Ainsi, des sous-ensembles composés de 4 membres ont été extraits de l'ensemble PEARO, en utilisant trois algorithmes de clustering : (i) K-means et Hiérarchique ascendant avec les deux approches (ii) complete-linkage et (iii) Ward. Dans un premiers temps, afin d'évaluer la qualité des sous-ensembles météorologiques créés par clustering, ils ont été évalués, en terme de vent, et comparés à un sous-ensemble aléatoire. Les résultats montrent, ainsi, que les méthodes de clustering ont, généralement, un impact positif sur la qualité des sous-ensembles créés. Ensuite, ces sous-ensembles ont été propagés par le modèles pX pour générer des sous-ensembles de la dispersion. Ces derniers ont été présentés sous forme de « cartes de décision » permettant de montrer les zones de fortes probabilités de contamination, ainsi que l'ensemble des zones qui sont exposées au risque. La performance des différentes méthodes de clustering est ainsi comparée à l'aide du score FMS. Les résultats montrent que les méthodes de clustering permettent de créer des sous-ensembles qui représentent une grande partie de l'incertitude de l'ensemble complet PEARO, et cela d'autant plus dans les situations avec un vent faible que celles avec un vent fort. Ce résultat a été confirmé par une évaluation des sous-ensembles de dispersion (sous forme de séries temporelles) par rapport aux observations radiologiques du ^{85}Kr .

Perspectives

Vers une généralisation de la chaîne PEARO-pX

La généralisation des résultats obtenus dans ce travail, est une perspective importante. Les approches développées doivent être validées sur des domaines géographiques différents, telles que les zones urbaines, vallées, ou encore les zones où les situations de vent faible sont prédominantes. De plus, l'utilisation du ^{85}Kr , comme traceur de la dispersion à l'échelle locale, ne tient pas compte de la contribution des mécanismes de puits, notamment le lessivage par précipitations (dépôt humide), qui peut modifier significativement la concentration d'un radionucléide réactif dans l'atmosphère. Ainsi, il sera intéressant de valider la chaîne de calcul PEARO-pX sur des applications de la dispersion d'autres radionucléides réactifs. L'exhalation et le transport de l'isotope du Radon-222 (^{222}Rn), un gaz radioactif d'origine naturelle, dans l'atmosphère semble être un très bon exemple d'application (Quérel et al., 2022), dans la mesure où l'IRSN dispose d'un réseau d'observation de la radioactivité ambiante, appelé Téléray et constitué de plus de 400 stations en France, qui permet régulièrement d'observer des pics de débit de dose dûs au lessivage des descendants du radon par les précipitations.

Apport de la résolution spatiale des prévisions météorologiques

Une autre perspective intéressante de ces travaux est de quantifier l'apport de la résolution spatiale des prévisions météorologiques utilisées pour le calcul de la dispersion atmosphérique. Pour ce faire, une démarche possible est de générer des prévisions de la dispersion à partir de prévisions météorologiques de résolutions différentes (par exemple la nouvelle version de la PEARO à 1.3 km, PEARP à 5 km) ainsi qu'une météorologie homogène sur tout le domaine de calcul de la dispersion. Utiliser la même démarche d'évaluation que celle développée dans ces travaux permettra de comparer les différentes prévisions de la dispersion obtenues.

Vers une meilleure identification des erreurs de modélisation et de terme source

Ces travaux portent principalement sur la propagation des incertitudes météorologiques dans les simulations de la dispersion atmosphérique. Les erreurs de modélisation ont été explorées en comparant de différentes formulations des écarts-types gaussiens. Toutefois, il semble intéressant de réaliser une étude, en ajoutant de l'incertitude de modélisation aux simulations de la dispersion PEARO-pX, en perturbant certaines paramétrisations dans la physique du modèles pX (e.g, schéma d'advection, schéma de reconstruction de panache, stabilité atmosphérique, écarts types de la similitude, schémas de dépôt etc.) et

en le comparant à des modèles plus précis (de type CFD et/ou lagrangien particulaire par exemple). De plus, dans le cas étudié ici, le terme source était parfaitement connu ; il serait intéressant d'appliquer la méthodologie développée dans cette thèse à des ensembles de simulations intégrant les incertitudes liées au rejet (quantité rejetée, cinétique, paramètres thermodynamiques du rejet, granulométrie...).

Vers une prévision opérationnelle PEARO-pX en cas d'accidents nucléaires

Enfin, le dernier chapitre de cette thèse présente des méthodes de réduction des ensembles de la PEARO afin d'optimiser le coût de calcul de la dispersion atmosphérique en cas d'urgences nucléaires. Des algorithmes de clustering ont été développés et validés, permettant la réduction de calcul tout en fournissant une bonne approximation de l'ensemble complet. Cependant, il serait intéressant de compléter cette étude par l'application d'algorithmes plus complexes, comme ceux à apprentissage profond, afin d'explorer la possibilité d'amélioration de la performance du clustering. Par ailleurs, les algorithmes de clustering ont été définis en tenant compte uniquement de critères basés sur les grandeurs physiques des modèles météorologiques. Ces méthodes pourraient également être améliorées en intégrant des paramètres liés plus directement à la prise de décision, comme par exemple la densité de population, la présence d'infrastructures critiques ou de terrains agricoles dans les zones de risque.

Enfin, pour calculer la similarité entre les membres PEARO, nous avons utilisé dans ces travaux la distance euclidienne. Cependant, il semble important d'explorer le coût de calcul associé à l'implémentation de distances plus adaptées, notamment la distance de Wasserstein qui permet de calculer la distance entre des distributions. Cette distance pourrait également être utilisée pour évaluer les cartes de dispersion ([Périllat, 2022](#)).

Complément de l'évaluation de la PEARO : diagrammes de rangs

En plus des scores montrés dans le Chapitre 3, des diagrammes de rangs ont aussi été calculés pour la validation des ensembles PEARO dans au Nord-Cotentin, dans la période de trois mois allant du 01 décembre 2020 jusqu'au 28 février 2021.

Comme pour les autres scores d'évaluations utilisés dans le Chapitre 3 (ratio spread-skill et biais), les diagrammes de rangs ont été aussi calculés indépendamment pour chacun des réseaux de de prévisions de la PEARO. La Figure A.1 montre le diagramme de rangs dans le cas du réseaux 15 :00 UTC. Les conclusions du diagnostic des diagrammes de rangs sont identiques aux autres scores d'évaluation : en terme de vitesse du vent, la PEARO présente un biais systématiques positif par rapport aux observations, alors que pour la direction du vent, les ensembles PEARO sont plutôt fiables.

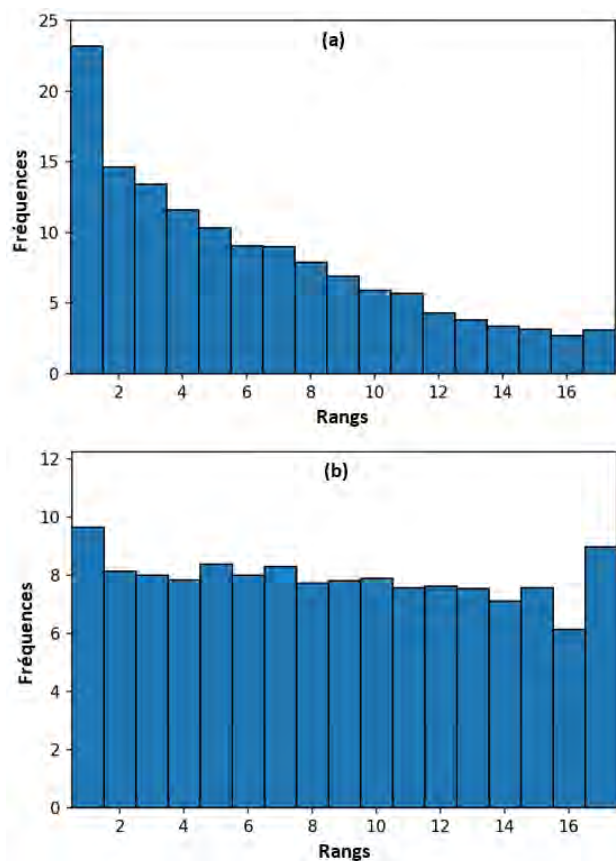


FIGURE A.1 – Histogrammes de rangs calculés pour la vitesse (a) et direction (b) du vent. Les données sont agrégées sur toutes les échéances de la PEARO, toutes les stations d'observations et tous les niveaux verticaux, dans la période allant du 01/12/2020 jusqu'au 28/02/2021.

Le pré-processeur AROME-to-pX

Le pré-processeur météorologique AROME-to-pX est un algorithme, codé en langage Python, qui permet d'écrire les données d'AROME sous format utilisable par le modèles pX (Figure B.1). Pour ce faire, les champs d'intérêt pour la dispersion sont extraits des fichiers bruts d'AROME. Ces fichiers au format Grib (version 2) contiennent les champs météorologiques sur la grille latitude-longitude du modèle AROME et sur les 25 niveaux verticaux de sortie de ce modèle. Les champs accumulés (e.g., rayonnement solaire de surface, nébulosité, précipitations) sont alors décumulés par intégration entre deux échéances de prévision successives, afin d'obtenir des valeurs instantanées. Un schéma de projection-interpolation (Figure B.2) permet, ensuite, d'interpoler les données d'AROME sur une grille cartésienne centrée sur le point source du rejet (dans notre cas, l'usine Orano). La résolution de cette nouvelle grille météorologique peut être variable, mais généralement on utilise une résolution proche de celle d'AROME (2.5 km). De plus, les bords de la grille cartésienne peuvent être aussi variables, et ils définissent le domaine de calcul de la dispersion. Finalement, les champs de stabilité atmosphérique sont calculés dans le domaine cartésien, avant d'écrire tous les champs atmosphériques dans des fichiers exploitables par le modèle pX.

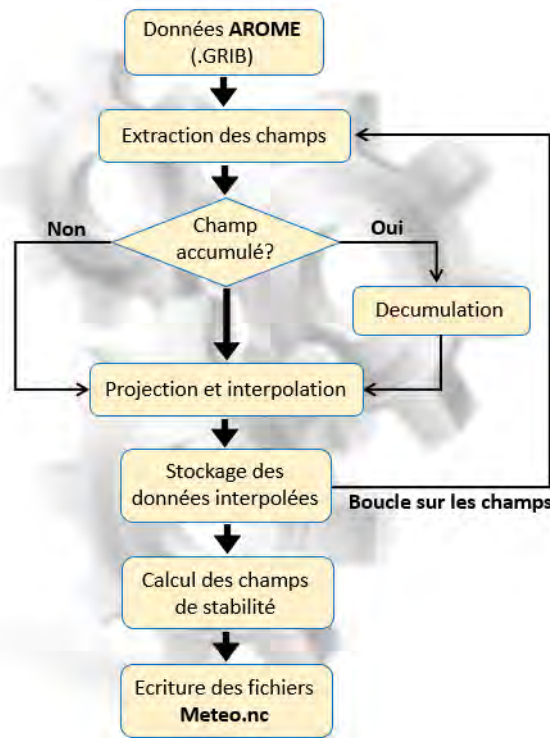


FIGURE B.1 – Organigramme décrivant l’ensemble des processus réalisés par l’algorithme AROME-to-pX dans le cadre de ces travaux de thèse. Cet algorithme, développé en langage Python (version 3.8), permet d’obtenir les données météorologiques utilisées en entrée du modèle pX (format netCDF), à partir des données en sortie d’AROME.

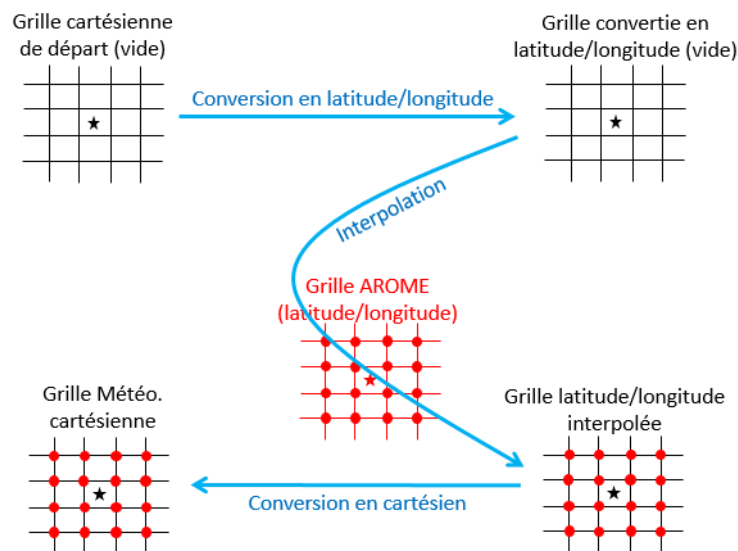


FIGURE B.2 – Le schéma de projection-interpolation implémenté dans AROME-to-pX. Ce schéma permet d’interpoler les champs d’AROME sur une grille cartésienne, centrée sur le point rejet, marqué en étoile (i.e., l’usine Orano La Hague).

Article de conférence : HARMO21

21st International conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
27-30 September 2022, Aveiro, Portugal

Towards the use of meteorological ensembles for short distance dispersion of radionuclides in case of an accidental release in the atmosphere

Youness El-Ouartassy^{1,2}, Irène Korsakissok², Matthieu Plu¹, Olivier Connan³, Laurent Descamps¹ and Laure Raynaud¹

¹CNRM, University of Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France

²Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PSE-SANTE/SESUC/BMCA, Fontenay-aux-Roses, France

³Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PSE-ENV/SRTE/LRC, Cherbourg-En-Cotentin, France

**21st International Conference on
Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes
27-30 September 2022, Aveiro, Portugal**

**TOWARDS THE USE OF METEOROLOGICAL ENSEMBLES FOR SHORT DISTANCE
DISPERSION OF RADIONUCLIDES IN CASE OF AN ACCIDENTAL RELEASE IN THE
ATMOSPHERE**

Youness El-Ouartassy^{1,2}, Irène Korsakissok², Matthieu Plu¹, Olivier Connan³, Laurent Descamps¹, Laure Raynaud¹

¹CNRM, University of Toulouse, Météo-France, CNRS, Toulouse, France

²Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), PSE-SANTE/SESUC/BMCA, Fontenay-aux-Roses, France

³Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN), PSE-ENV/SRTE/LRC, Cherbourg-En-Cotentin, France

Abstract: Numerical models of atmospheric dispersion are used for predicting the health and environmental consequences of nuclear accidents, in order to anticipate the countermeasures necessary to protect the populations. However, the simulations of these models suffer from significant uncertainties, arising in particular from input data: weather conditions and source term. To characterize weather uncertainties, it is essential to combine a well-known source term data and meteorological ensembles to generate ensemble dispersion simulations which has the potential to produce different possible scenarios of radionuclides dispersion during emergency situations. In this study, the fine-scale operational weather ensemble AROME-EPS from Météo-France is coupled to the Gaussian puff model pX developed by the French Institute for Radiation Protection and Nuclear Safety (IRSN). The source term data is provided by Orano La Hague reprocessing plant (RP) that regularly discharges ⁸⁵Kr during the spent nuclear fuel reprocessing process. Then, to evaluate the dispersion results, a continuous measurement campaign of ⁸⁵Kr air concentration was recently conducted by the Laboratory of Radioecology in Cherbourg (LRC) of IRSN, around RP in the North-Cotentin peninsula. This work investigates the meteorological uncertainties in dispersion simulations at local and medium distances (2-20km). The probabilistic performance of the dispersion ensemble simulations was evaluated using two probabilistic scores: Relative Operating Characteristic (ROC) curves and Peirce Skill Score (PSS). The results highlight the added value of ensemble forecasts compared to a single deterministic one, and their potential interest in the decision process during crisis situations.

Key words: *Ensembles, meteorological uncertainties, atmospheric dispersion model, ⁸⁵Kr, pX, AROME-EPS.*

INTRODUCTION

The dispersion of radionuclides released into the atmosphere depends on the physico-chemical properties of the released substances, the emission parameters (e.g. source elevation, timing and duration of the release) and meteorological conditions at the accident site (e.g. wind speed and direction). In order to forecast the dispersion of radionuclides in the early phase of nuclear accidents and to support decisions and warnings, atmospheric dispersion models (ADM) are commonly used to predict the transport of radioactive pollutants through the atmosphere as well as the quantities of radioactive material deposited on the ground. This information is essential for decision makers in order to anticipate the countermeasures necessary to protect the population against contamination.

The outputs from ADM simulations suffer from significant uncertainties that hinder their use in an operational context. Meteorological forecasts, which are an essential input data, are one of the main sources of these uncertainties. Weather information used for dispersion prediction is, frequently, provided by Numerical Weather Predictions (NWP) as 3-D or 4-D physical fields. For weather prediction, meteorological uncertainties are usually accounted for by building an ensemble of NWP instead of using a single, deterministic forecast. The objective of this work is to investigate the impact of the meteorological uncertainties on local-scale dispersion by using the operational high-resolution meteorological ensemble AROME-EPS (Bouttier et al., 2012) of Météo-France. It is a 16-members ensemble with a resolution of

2.5 x 2.5 km and hourly forecasts. Given the objective of the study, only first 25 vertical levels [10-3000 m] are used to cover the entire Atmospheric Boundary Layer (ABL). Then, AROME-EPS ensembles are used as input of IRSN's short-range Gaussian puff model pX (Korsakissok et al., 2013) around La Hague Reprocessing Plant (RP) at local and medium scales (2-20 km) (Figure 1).

CASE STUDY

The present study focuses on the dispersion of ^{85}Kr at short and medium distances (less than 20 km), in the North-Cotentin peninsula located in the North-West of France territory (Figure 1). The potential interest of the La Hague area is that the release rate of ^{85}Kr emitted by the RP into the atmosphere is known with a good accuracy. In addition, there is a sufficient density of meteorological measurements combined with ^{85}Kr radiological air concentration measurements (Figure 1). Meteorological measurements are carried out by Météo-France on a regular basis. IRSN's LRC laboratory regularly performs meteorological and radiological measurements in the framework of measurement campaigns (Connan et al., 2014). In this work, continuous radiological measurements (every 1 minute) were conducted by LRC as part of the DISKRYNOC project (DISpersion of KRYpton in the North-Cotentin). Additional meteorological and air concentration measurements, as well as release data (every 10 minutes), are carried out by Orano for the environmental monitoring of the RP. For these reasons, the La Hague experimental site is an ideal environment for the study and validation of atmospheric dispersion simulations.



Figure 1. Location of North-Cotentin peninsula (left panel) and map of the monitoring sites (right panel). The dots and squares indicate the locations of the ^{85}Kr measurement stations carried out by IRSN and RP, respectively, as part of the DISKRYNOC campaign. The RP facility location is marked with a star. The circles indicate the locations of the 3D-wind measurement sites (from IRSN or Météo-France).

COUPLING AROME-EPS ENSEMBLES TO DISPERSION MODEL pX

Before coupling the numerical weather predictions from AROME-EPS to the pX model, it is necessary to evaluate them in order to have an exhaustive overview of their quality and to take it into account in the interpretation of atmospheric dispersion simulations. Wind speed and direction are the most influential variables on the transport of a plume through the atmosphere. The meteorological ensembles were thus evaluated by calculating comparative evaluation scores (e.g bias, spread-skill ratio, rank diagram) based on the observations of 3D-wind over a two-months period (Dec. 2020-Jan. 2021). The results of this evaluation showed that the high horizontal, vertical and temporal resolution of the AROME-EPS forecasts allow them to correctly represent the uncertainties within ABL, despite slight errors in the wind speed forecast.

Simulations set-up

Once meteorological forecasts from AROME-EPS have been qualified, they are coupled to the Gaussian dispersion model pX by running in parallel several simulations with the pX model, each using a different member of the AROME-EPS ensemble as input (Figure 2), along with the source term data provided by RP La Hague. This allows to generate an ensemble of dispersion simulations composed of 16 members. Furthermore, in order to quantify the benefit of using ensembles instead of deterministic simulations, an additional pX simulation was performed using the deterministic weather forecast from AROME as input of the model. Then, in order to ensure that the source emission does not occur above the ABL, a minimum value of 200 m is imposed to the ABL height before being applied to the pX simulations. In addition, the effects of the complex topography (coastline, rocky terrain) and buildings on the plume dispersion may lead to downwash effects that are not explicitly taken into account by the Gaussian puff model. To

compensate for this limitation, 8 effective heights have been tested: 20, 50, 100, 150 and 200 m. The most optimum simulations were obtained by using the physical stack height of 100 m.

Even though the NWP forecasts are given with an hourly frequency, the pX simulations were performed in this study with a time step of 10 minutes in order to better capture the temporal variations of the plume. Two stability diagnoses were used to perform pX simulations: Pasquill and Doury (El-Ouartassy et al., 2022).

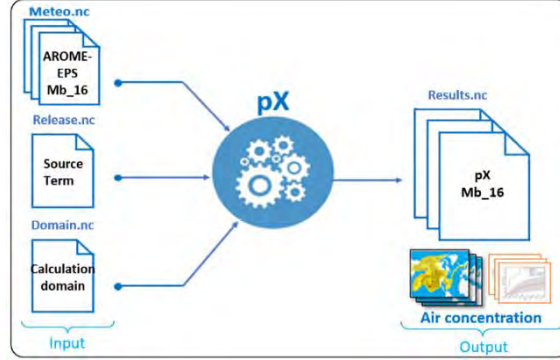


Figure 2. Coupling of AROME-EPS meteorological ensembles to the Gaussian dispersion model pX.

Statistical indicators for dispersion ensemble evaluation

It is often a desirable feature for a dispersion model to be able to correctly predict a threshold exceedance. It is particularly useful for decision-making purposes, when protective actions for the population are based on the prediction of zones where a given dose threshold could be exceeded. Evaluating the model performance for this kind of purpose is often based on contingency tables allowing to compare the series of observations and simulations by counting four features: (i) true positive (TP) when a peak is observed and well simulated, (ii) false negative (FN) when a peak is observed but not simulated, (iii) false positive (FP) when there is no observed but simulated peak and (iv) true negative (TN) when there is no observed and no simulated peak. Then, the performance of the ensemble is measured using hit rate (H) and false alarm rate (F) metrics. The hit rate is the fraction of the observed events that are successfully reproduced (Equation (1)). The false alarm rate is the fraction of the simulated peaks that are not observed (Equation (2)).

$$H = \frac{TP}{TP + FN} \quad (1)$$

$$F = \frac{FP}{FP + TN} \quad (2)$$

In the case of the AROME-EPS-pX ensemble, there are 16 possible decision thresholds ($x=1,2,\dots,16$). In order to identify the most optimal ones, the ROC (Relative Operating Characteristic) curves are commonly used as a graphical summary of the decision-making skill of an ensemble, by connecting all points $[F(x), H(x)]$ for each decision threshold x . In addition, to better capture the internal variation of the performance of the model according to the decision thresholds, the Peirce skill score (PSS) was calculated for each x , as follows:

$$PSS(x) = H(x) - F(x) = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{(TP + FN) \times (FP + TN)} \quad (3)$$

Note that the threshold that presents a better compromise between the probability of detection and the probability of false detection of events corresponds to the one that maximizes the PSS.

RESULTS

Simulations and observations at all stations were aggregated in order to investigate the probabilistic performance of the ensembles, using ROC curves and PSS. As shown in Figure 3, The pX-Pasquill ensembles perform better than pX-Doury, with a $PSS_{MAX}=0.72$ corresponding to an optimal decision thresholds of 3 and 4 members (against a $PSS_{MAX}=0.63$ and optimal decision thresholds of 3 members for

pX-Doury ensembles). This difference in performance seems normal given that the variation in atmospheric stability conditions is better captured with the Pasquill's stability classes (six classes for Pasquill against two classes for Doury). In both cases, the ensemble performs better than the deterministic simulation in a range of seven decision thresholds, which represents almost 50% of the possible values of the decision thresholds. These results highlight the robustness of the probabilistic simulations compared to the deterministic simulation in the process of the prediction of threshold exceedances.

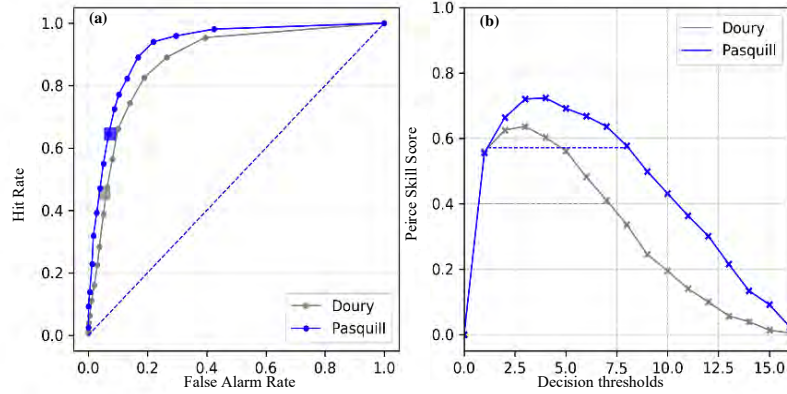


Figure 3. ROC curves (a) and the PSS as a function of decision thresholds (b) of the pX ensemble simulations performed with Pasquill stability classes and Doury classes, by aggregating simulations and observations at all stations. The values of the scores for the deterministic pX simulation are indicated by squares in the ROC curves and by horizontal dashed lines in the PSS curves. The diagonal dashed lines are the no-skill lines ($H=F$).

To go further into the analysis of the probabilistic performance of the ensembles, the effect of the distance from the source is investigated in Figure 4. In this case, the dispersion simulations were generated, with the two diffusion configurations of Pasquill and Doury, by aggregating data for two groups of stations. The first is the -10km group which contains stations at distances less than 10km from the source: PTILH (2km), Digulleville (2.6km), Beaumont (4.2km) and Gréville (5.2km). The second is the $+10\text{km}$ group which contains stations beyond 10km: Urville (10.4km), Ludiver (12.7km), Octeville (17.7km) and LRC (18km). For both groups of stations, pX-Pasquill simulations give better scores than pX-Doury, both for deterministic and ensemble pX outputs.

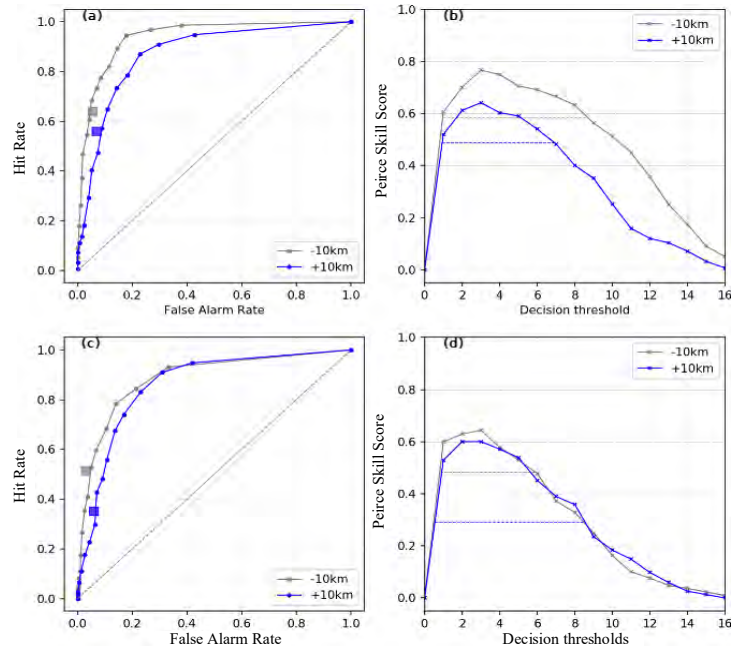


Figure 4. ROC curves (a, c) and the PSS as a function of decision thresholds (b) of the pX ensemble simulations performed with Pasquill stability classes (a, b) and Doury classes (c, d), by aggregating data in the two groups of stations: -10km (gray) and $+10\text{km}$ (blue).

Taking into account both meteorological and model uncertainties would imply generating an ensemble by also perturbing model parameters (Pasquill/Doury, source elevation, stability). In this perspective, a 32-member super-ensemble was generated by combining pX-Pasquill and pX-Doury ensembles. The result (not shown here) is very similar to the pX-Pasquill ensemble.

CONCLUSIONS AND PERSPECTIVES

In this study we explored the potential value of using fine-scale spatial and temporal meteorological ensembles to represent the effect of meteorological uncertainties on ADM outputs. The high-resolution operational forecasts AROME-EPS of Météo-France have been coupled to IRSN's Gaussian puff short-range dispersion model pX to generate a 16-member dispersion ensemble which accounts for meteorological uncertainties. This study presents a strategie to evaluate the ability of a dispersion ensemble to forecast threshold exceedances, using probabilistic scores. For this purpose, we used an original data set of continuous ^{85}Kr air concentration measurements (DISKRYNOC campaign recently conducted by IRSN), along with a well-known source term (every 10 minutes, provided by Orano La Hague RP) and meteorological data (NWP from Météo-France and continuous observations from Météo-France/IRSN).

As a first step, the assessment of the quality of the AROME-EPS forecasts, in terms of wind speed and direction, in the North-Cotentin peninsula was carried out, using meteorological observations, over the two-month period of interest (Dec. 2020-Jan. 2021). The results showed that AROME-EPS performs well in the North-Cotentin area. Then, an ensemble dispersion modeling chain was implemented using the AROME-EPS forecasts as inputs to the pX model. Then, two configurations of dispersion simulations were run, with Pasquill and Doury Gaussian standard deviations. The probabilistic consistency of the two resulting dispersion ensembles was then compared by calculating two probabilistic scores: ROC curves and PSS. This evaluation process was performed in two parts. First, by comparing the overall performance of the two configurations by aggregating the data from all the measurement stations. In this case the best results were obtained with Pasquill standard deviations. Secondly, by comparing the performance of the two configurations in the near fields (stations located less than 10km from the source) and far fields (stations beyond 10km from the source). The results showed that the Pasquill simulations were still the most consistent with observations. In all cases studied, the best decision threshold is 3 members, and the ensembles performed better than the deterministic simulations. For operational purposes during emergency situations, this result would imply that in this configuration, when 3 or more members of the ensemble forecast a threshold exceedance, protective actions should be recommended.

To complement this study, it would be interesting to develop complementary indicators that evaluate the consistency of dispersion ensembles in terms of intensity between the simulated and observed peaks. Another perspective of this study is to work on the clustering of the meteorological ensembles in a perspective of reducing the number of members while keeping the consistency of the dispersion ensembles. This can significantly reduce the computational time of ADM runs, which is a crucial issue in the case of a real nuclear accident.

REFERENCES

- Bouttier, F., L. Raynaud, O. Nuissier and B. Ménétrier, 2016: Sensitivity of the AROME ensemble to initial and surface perturbations during HyMeX. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society.*, **142**, 390–403.
- Connan, O., L. Solier, D. Hébert, D. Maro, M. Lamotte, C. Voiseux, P. Laguionie, O. Cazimajou, S. Le Cavelier and C. Godinot, 2014: Near-field krypton-85 measurements in stable meteorological conditions around the AREVA NC La Hague reprocessing plant: estimation of atmospheric transfer coefficients. *Journal of environmental radioactivity*, **137**, 142–149.
- El-Ouartassy, Y., I. Korsakissok, M. Plu, O. Connan, L. Descamps et L. Raynaud, 2022: Combining short-range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles: probabilistic indicators and evaluation during a ^{85}Kr field campaign. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **22(24)**, 15793–15816.
- Korsakissok, I., A. Mathieu, and D. Didier, 2013: Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the Fukushima Nuclear Power Plant accident: A local-scale simulation and sensitivity study. *Atmospheric environment*, **70**, 267–279.

Table des figures

1.1	Profil vertical de la température dans les différentes couches de l'atmosphère. Inspiré de Vendel (2011).	20
1.2	Représentation schématique de la turbulence d'origine mécanique : la modification de la trajectoire du vent (\vec{U}) par un obstacle, et la création d'une zone de turbulence mécanique.	25
1.3	Représentation schématique de la turbulence d'origine thermique, et la création des gros tourbillons thermiques. Les masses d'air chaud au voisinage du sol sont représentées par la couleur rouge, alors que les masses d'air froid en altitude sont représentées par la couleur bleue.	26
1.4	Dispersion d'une bouffée transportée par l'air dans trois conditions de turbulence : (a) taille des tourbillons plus petite que celle de la bouffée, (b) taille des tourbillons plus grande que celle de la bouffée (c) taille des tourbillons et celle de la bouffée comparables. Source : Seinfeld and Pandis (1998).	27
1.5	(a) : Représentation de la couche limite qui se compose de la couche d'Ekman et la couche de surface (Source : Korsakissok, 2009). (b) : Évolution de la couche limite au cours d'une journée, et la mise en place des phénomènes de turbulence. La hauteur de la couche limite est maximale le jour et minimale la nuit (Source Aumond, 2011).	28
1.6	Les conditions de stabilité atmosphérique, selon le gradient vertical de température. Inspiré du schéma de Hadjira Schmitt-Foudhil, École des Ponts ParisTech, 2010.	29
1.7	Représentation du phénomène de l'inversion de température en altitude dans la journée (a) et près du sol dans la nuit (b). Source : Korsakissok (2009).	30
1.8	Advection d'un nuage de polluant en fonction du type d'écoulement entre deux instants t_0 et t_1 (avec $t_0 < t_1$). (a) : Écoulement uniforme. (b) : Écoulement cisailé (couche limite). (c) : Écoulement divergent au voisinage d'une paroi. Source : Perkins et al. (2005).	31

1.9	Illustration schématique de la représentation d'un panache par un modèle gaussien de panache et un modèle gaussien à bouffées. Inspiré de Korsakissok (2009)	41
1.10	Illustration des deux approches d'assimilation séquentielle 3D-var et 4D-var. Cette dernière assimile les observations les plus récentes (points) en s'appuyant sur la trajectoire de l'ébauche (courbe noire) : à partir de l'état initial analysé ($x_a(t_0)$), l'ébauche est rectifiée (courbe grise en pointillés) jusqu'au bout de la fenêtre d'assimilation (l'aire en bleu). L'encadré rouge à gauche montre le cas particulier de l'approche 3D-var, qui permet d'estimer l'état initial optimal ($x_a(t_0)$) à un pas de temps fixe (t_0). Inspiré de Lahoz and Schneider (2014)	50
1.11	Illustration schématique du principe de la prévision d'ensemble. Les courbes grises correspondent aux membres de l'ensemble, obtenus à partir de perturbation de l'état initial. Les courbes noire et rouge représentent la prévision déterministe et l'observation, respectivement. Inspiré du schéma de Laurent Descamps, Météo-France.	52
2.1	En haut à gauche : la position géographique du domaine de calcul sur la carte de France. En haut à droite : le domaine de calcul de la dispersion au nord de la péninsule du Cotentin et la grille météorologique d'AROME dans ce domaine. En bas : la topographie de la pointe de La Hague et la position de l'usine de retraitement du combustibles nucléaire Orano.	57
2.2	Rose des vents représentant les fréquences des directions du vent à 10 m mesuré en 2020 sur le site de Orano. Par définition, la direction du vent est l'angle de sa provenance, et l'angle 0° correspond à un vent de nord. Source (Orano, 2020).	59
2.3	Le schéma de désintégration du ^{85}Kr . Les lignes horizontales représentent les niveaux d'énergie en keV.	61
2.4	Structure d'un assemblage combustible pour un réacteur de type à eau sous pression. Source Orano (2021b).	65
2.5	Le principe de fonctionnement d'une chambre à ionisation à circulation de gaz, utilisée pour mesurer l'activité radioactive en ^{85}Kr dans les deux cheminées UP2-800 et UP3 de l'usine Orano La Hague.	66
2.6	Les activités annuelles du ^{85}Kr libéré dans l'atmosphère par l'usine Orano La Hague, de 2018 à 2021. La ligne horizontale en pointillés indique le seuil annuel maximal autorisé (470 PBq/an), d'après la décision de l'ASN du 22/12/2015.	67

2.7	Photographie du Lidar Doppler (version Leosphere Windcube 2) installé dans la station PTILH, et utilisé dans ce manuscrit.	69
2.8	Carte des sites d'observations, météorologiques et radiologiques, autour de l'usine Orano La Hague (indiquée par une étoile). Les cercles indiquent les emplacements des sites de mesure du vent (de l'IRSN ou de Météo-France). Les points et les carrés indiquent les emplacements des stations de mesure du ^{85}Kr réalisées, respectivement, par l'IRSN et Orano dans le cadre de la campagne DISKRYNOC.	71
2.9	Station de mesures continues de la concentration atmosphérique du ^{85}Kr sur le site de Ludiver, dans le cadre de la campagne DISKRYNOC. L'abri de protection des dispositifs est composé de deux parties : une partie supérieure fermée, permettant de protéger l'ordinateur et la batterie, et une partie inférieure aérée vers laquelle est orientée la fenêtre de comptage. . .	72
2.10	Compteur β proportionnel Berthold LB134, utilisé pour le calcul de l'activité volumique du ^{85}Kr dans la station LRC.	73
2.11	Schéma de fonctionnement du modèle AROME. Source Bouttier (2007). . .	75
2.12	Le domaine géographique couvert par AROME. Le cadre extérieur (en bleu) est le domaine de calcul du modèle. Le cadre intérieur (en vert) est le domaine de sortie (post-traitement) de la version de AROME utilisée dans le présent manuscrit. Ces domaines sont les mêmes pour la PEARO. Source : Bouttier and Raynaud (2018).	76
2.13	Chronologie des principales évolutions de la prévision d'ensemble PEARO depuis sa mise en opérationnel pour la première fois en 2016 jusqu'au 2022. Source Mounier (2022).	79
2.14	Chronologie des principales évolutions du modèle pX depuis sa première version développée en 2008 jusqu'à la dernière version développée en 2019, qui est utilisée dans ce manuscrit. La liste des différentes modifications dans chaque version n'est pas exhaustive.	81
2.15	Représentation schématique de la méthode des images implémentée dans le modèle pX, afin de prendre en compte la réflexion du panache sur le sol et la couche d'inversion. Source Nicolas and Craffe (2003).	82
2.16	Reconstruction du panache avec trois cas du taux de recouvrement : (i) très élevé, (ii) faible et (ii) optimal. On remarque que dans le premier et le troisième cas, on obtient le même résultat sur l'aspect continu du panache, mais avec un nombre moins important de bouffées dans le troisième cas. . .	86
2.17	Les différentes formes d'un diagramme de rang, avec l'interprétation de chacune, pour un exemple d'un ensemble composé de 5 membres.	89

2.18 Exemple d'un problème d'affectation sous forme de graphe biparti. L'objectif de l'algorithme de Munkres est de trouver une bijection entre les membres des deux ensembles \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 , avec une distance totale d'affectation (somme des arêtes rouges dans cet exemple) minimale. 93

2.19 Exemple d'un clustering d'un nuage de points en 3 clusters. Les centres d'inertie de chaque cluster sont représentés par des étoiles. Le principe du clustering est de maximiser la distance inter-cluster et minimiser la distance intra-cluster. 96

2.20 À gauche : exemple d'un dendrogramme du CHA, avec les étapes de regroupements des classes. À droite : courbe d'inertie intra-classe en fonction du nombre de classes, utilisée dans la méthode du coude pour estimer le nombre de classes optimal. Dans cet exemple un nombre de classes $K = 3$ peut être un bon choix. 98

2.21 Les étapes de l'algorithme K-means. Un jeu de données simple, composé de 10 individus, est partitionné en 2 clusters. Les individus sont représentés par des cercles, et les barycentres des clusters par des étoiles. Les flèches en pointillées indiquent la distance de chaque individu au barycentre le plus proche, i.e. au cluster auquel l'individu est assigné. Les couleurs bleue et rouge distinguent les deux clusters 100

3.1 Chaîne de traitement PEARO-pX permettant de générer des ensembles de la dispersion à l'aide du modèle pX alimenté par les ensembles météorologiques PEARO et les données de rejet du ^{85}Kr fournies par l'usine Orano La Hague. 105

4.1 Les trois membres de l'ensemble pX-Pasquill (désignés par mb1, mb2 et mb3, de haut en bas) simulant l'activité volumique du ^{85}Kr , dans la station LRC, du 08/12/2020 à 12 :00 UTC au 13/12/2020 à 12 :00 UTC. Chacune des trois simulations a été générée cinq fois, chacune avec une valeur de HCL stationnaire (désignée par ABLH). La ligne horizontale en pointillé indique le seuil de concentration dans l'air (1545 Bq.m^{-3}) à partir duquel on considère que les pics sont significatifs. 133

4.2 Courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus pour les simulations d'ensemble pX-Doury, en agrégeant les simulations et les observations dans toutes les stations de mesures. Chaque courbe représente une configuration $(\Delta t, \tau)$ donnée. Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans la figure de gauche et par les lignes horizontales en pointillés sur celle de droite. 135

4.3	Courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus pour les simulations d'ensemble pX-Doury, en agrégeant les données dans les deux groupes de stations : $-10km$ (Beaumont, Digulleville, Gréville, et PTILH) et $+10km$ (LRC, Ludiver, Octeville et Urville). Chaque courbe représente un groupe de stations. Les scores sont calculés en utilisant la configuration de discrétisation optimale ($\Delta t = 3 h, \tau = 2 h$). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans la figure de gauche et par les lignes horizontales en pointillés sur celle de droite.	136
4.4	Illustration du cycle de configuration à quatre réseaux de prévision pour la construction des ensembles de la PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique (en gras).	138
4.5	Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus avec l'utilisation des deux méthodes de construction des ensembles météorologiques (1fcst désigne la méthode utilisant un seul réseau de prévision et 4fcst la méthode utilisant 4 réseaux). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par les carrés dans les courbes ROC et par les lignes horizontales en pointillé dans le score PSS.	139
4.6	Simulations déterministes AROME-pX de la concentration du ^{85}Kr dans l'air, en utilisant les deux méthodes de construction des prévisions météorologiques dédiées au calcul de la dispersion, comparées aux observations radiologiques dans la station Ludiver de 08/12/2020 au 15/12/2020. La ligne horizontale en pointillé indique le seuil de l'activité volumique à partir duquel on considère les pic du ^{85}Kr	139
4.7	Boîtes à moustaches représentant les distributions des différences de distances entre les membres PEARO (en m.s^{-1}) utilisant les deux approches de raccordement aléatoire et Munkres. Les abscisses représentent les moments de raccordement couvrant une période d'une semaine (du 08 au 15/12/2020) dans le cas de l'utilisation d'un seul réseau PEARO pour construire les ensembles, soit un moment de raccordement toutes les 24 heures. Les différences positives indiquent des sauts de raccordement aléatoire supérieurs aux sauts de raccordement Munkres et donc de meilleurs résultats avec ce dernier.	141
4.8	Même chose que la Figure 4.7, mais en utilisant 4 réseaux par jour, soit un point toutes les 6 heures, pour construire les ensembles PEARO.	142

4.9 Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) obtenus après l'utilisation des deux approches du raccordement des membres PEARO (aléatoire et Munkres). En haut : les scores en utilisant un seul réseau de prévision pour la construction des ensembles PEARO. En bas : les scores en utilisant 4 réseaux. La période de calcul est la même que pour les Figures 4.7 et 4.8 143

5.1 L'inertie intra-cluster en fonction du nombre de classes pour chacune des méthodes de clustering, calculée dans la période 07–20 janv. 2021. Les boîtes à moustache représentent les distributions de l'inertie calculée chaque jour. Les médianes des distributions (traits rouges) sont liées par la courbe noire. 153

5.2 Exemple de calcul de l'indice de représentativité pour un membre d'un cluster. Les flèches en pointillé représentent les distances du membre par rapport aux autres membres de son cluster, tandis que les flèches en continu indiquent les distances du membre par rapport aux membres des autres clusters. L'indice de représentativité de ce membre est ainsi le rapport de la moyenne des deux distances. Le même processus est répété pour tous les membres d'un cluster, et le membre retenu est celui qui minimise l'indice de représentativité. 154

5.3 Évolution du ratio spread-skill, pour la vitesse (en haut) et direction (en bas) du vent à 100 m, des quatre sous-ensembles en fonction des 24 échéances de prévision ([9–32], réseau 15h UTC) utilisées pour construire les ensembles PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique. Les ratios sont calculés sur la période du 07 au 27 janvier 2021, au point source du ^{85}Kr , superposé au centre du domaine de calcul. 157

5.4 Évolution de la différence du CRPS entre chaque sous-ensemble du clustering et le sous ensemble aléatoire, pour la vitesse (en haut) et direction (en bas) du vent à 100 m, en fonction des 24 échéances de prévision ([9–32], réseau 15h UTC) utilisées pour construire les ensembles PEARO dédiés au calcul de la dispersion atmosphérique. Les points indiquent les valeurs qui sont significativement différentes du CRPS du sous-ensemble aléatoire, selon le test de significativité de Wilcoxon. Les valeurs négatives indiquent de meilleurs résultats pour les ensembles issus du clustering. 159

5.5	(a) : Délimitation de la zone à risque (en rouge) à partir de l'ensemble PEARO-pX (en gris). (b) : Exemple d'une carte de décision dans la zone d'étude (situation du 10/01/2021 à 07h UTC). La zone à risque est représentée en rouge. Les membres PEARO-pX sont délimités par le contour gris. Les probabilités de dépassement de seuil aux points de grille sont représentées par les niveaux de gris.	161
5.6	Illustration du calcul du FMS d'un sous-ensemble donné. La zone de risque de l'ensemble complet PEARO-pX est représentée en rouge (\mathcal{A}), alors que celle associée au sous-ensemble est représentée en bleu (\mathcal{B}).	162
5.7	Boîtes à moustaches représentant les distributions du FMS calculé sur les zones de risque associées à chacun des quatre sous-ensembles testés dans ce chapitre, en considérant le champs du vent seul comme variable prédictive du clustering (a) et le vent combiné au gradient de température à 100 m (b). Le FMS est calculé dans la période 07–27/01/2021.	163
5.8	Évolution temporelle de la différence du FMS entre chacun des trois sous-ensembles du clustering et le sous-ensemble aléatoire. Les valeurs négatives indiquent une meilleure performance du clustering. La ligne horizontale en pointillé indique la valeur de la différence nulle, où le FMS du sous-ensemble aléatoire est égale à celui du clustering.	164
5.9	Surface des zones de risque de l'ensemble PEARO-pX en fonction de la vitesse vent à 100 m à la station Orano, dans la période d'étude (07–27/01/2021). La ligne noire représente la droite de régression linéaire, ayant un coefficient de détermination $R^2 = 0.42$	165
5.10	Série temporelle des observations ultrasoniques du vent à 100 m mesuré par Sodar dans la station Orano, située au centre du domaine de calcul de la dispersion atmosphérique. Les couleurs indiquent les trois intervalles de la vitesse du vent (en $m.s^{-1}$) testés : $[0, 7]$, $]7, 12]$ et $]12, +\infty[$	166
5.11	Boîtes à moustaches représentant les distributions du FMS calculé par rapport aux zones de risque associées à chacun des quatre sous-ensembles testés dans ce chapitre, pour les conditions du vent : vent faible (a), vent modéré (b) et vent fort (c).	167
5.12	Cartes de décisions des quatre sous-ensembles réduits ainsi que l'ensemble complet PEARO-pX, dans la situation du 07/01/2021 à 07h (UTC) où la vitesse du vent à 100 m, mesurée à point source, est égale à $4.8 m.s^{-1}$ (vent faible). Les aires rouges représentent les zones de risque tandis que les probabilités de dépassement de seuil de concentration du ^{85}Kr sont représentées par les niveaux de gris.	168

5.13 Même chose que la Figure 5.12, mais pour la situation du 11/01/2021 à 06h (UTC) où le vent à 100 m, mesuré au point source est égale à 8.5 m.s^{-1} (vent modéré). 168

5.14 Même chose que la Figure 5.12, mais pour la situation du 20/01/2021 à 17h (UTC) où le vent à 100 m, mesuré au point source est égale à 18.3 m.s^{-1} (vent fort). 169

5.15 Comparaison des courbes ROC (à gauche) et score PSS en fonction des seuils de décision (à droite) pour les 3 sous-ensembles du clustering et 1000 sous-ensembles aléatoires (panache en cyan). Pour les courbes ROC on ajoute celle de l'ensemble complet PEARO-pX (courbe noire). Les valeurs des scores pour la simulation pX déterministe sont indiquées par un carré dans les courbes ROC et par une lignes horizontale en pointillé dans le score PSS. 171

A.1 Histogrammes de rangs calculés pour la vitesse (a) et direction (b) du vent. Les données sont agrégées sur toutes les échéances de la PEARO, toutes les stations d'observations et tous les niveaux verticaux, dans la période allant du 01/12/2020 jusqu'au 28/02/2021. 180

B.1 Organigramme décrivant l'ensemble des processus réalisés par l'algorithme AROME-to-pX dans le cadre de ces travaux de thèse. Cet algorithme, développé en langage Python (version 3.8), permet d'obtenir les données météorologiques utilisées en entrée du modèle pX (format netCDF), à partir des données en sortie d'AROME. 182

B.2 Le schéma de projection-interpolation implémenté dans AROME-to-pX. Ce schéma permet d'interpoler les champs d'AROME sur une grille cartésienne, centrée sur le point rejet, marqué en étoile (i.e., l'usine Orano La Hague). 182

Liste des tableaux

1.1	Échelles caractéristiques des mouvements atmosphériques.	22
1.2	Les classes de stabilité de Pasquill-Turner, d'après Turner (1969).	44
1.3	Les classes de stabilité de Pasquill, d'après le diagnostic du gradient de température à 100 m, et la correspondance avec les classes de Doury.	44
1.4	Les coefficients de Doury pour la diffusion faible et la diffusion normale.	44
1.5	Les coefficients de Pasquill pour σ_y	45
1.6	Les coefficients de Pasquill pour σ_z	45
2.1	Vitesses moyennes et maximales mensuelles du vent à 10 m sur le site d'Orano en 2020. Source (Orano, 2020).	58
2.2	Abondance relative des différents isotopes stables du krypton dans la nature. Source : Aoki and Makide (2005)	60
2.3	Récapitulatif de quelques propriétés physiques de l'isotope du ^{85}Kr	61
2.4	Caractéristiques des deux sources d'émission du ^{85}Kr , UP2-800 et UP3, de l'usine Orano La Hague. Source : Leroy (2010).	64
2.5	Récapitulatif des différentes stations de mesures 3D du vent utilisées dans ce manuscrit pour la validation des prévisions d'ensemble PEARO au Nord-Cotentin.	70
2.6	Description des huit stations DISKRYNOC, pour les mesures continues de la concentration atmosphérique de ^{85}Kr , utilisées dans ce manuscrit.	72
2.7	Les périodes d'étude considérées dans ces travaux de thèse, dans le cadre de la modélisation et de la validation de la dispersion atmosphérique.	74
2.8	Comparaison générale des caractéristiques du modèle AROME et sa version ensembliste PEARO.	78
4.1	Comparaison de la performance des simulations pX-Doury et pX-Pasquill dans les configurations déterministes et probabilistes.	137
4.2	Les intervalles des échéances définissant les périodes de calcul des matrices de distances entre les membres PEARO, en fonction de la méthode utilisée pour construire les ensembles PEARO couplés au modèle de dispersion pX.	141

5.1	Comparaison de l'espace de définition des membres PEARO en entrée du modèle pX (avant la réduction de dimension) et en entrée des algorithmes de clustering (après la réduction de dimension).	150
5.2	Récapitulatif des éléments de configuration des expériences de clustering réalisées dans ce manuscrit.	155
5.3	Intervalles du vent définis pour étudier la sensibilité de la pertinence des cartes de décision aux conditions du vent, et le nombre de cas de chaque situation au cours de la période d'étude	165

Liste des Acronymes

Institutions et laboratoires

ASN	Autorité de Sûreté Nucléaire.
BMCA	Bureau de Modélisation des transferts dans l'environnement pour l'étude des Conséquences des Accidents.
CEPMMT	Centre Européen pour la Prévision Météorologique à Moyen Terme.
CTC	Centre Technique de Crise.
CNRM	Centre National de Recherches Météorologiques.
ECMWF	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts.
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire.
LMFA	Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique.
LRC	Laboratoire de Radioécologie de Cherbourg.
UNSCEAR	United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation
UP2-800/UP3	les deux Unités de Production de l'usine Orano La Hague, dans lesquelles le rejet du ^{85}Kr s'effectue.
WHO	World Health Organization

Modèles numériques

AEARO	Assimilation d'Ensemble AROME.
AROME	Applications de la Recherche à l'Opérationnel à Méso-Échelle.
ARPEGE	Action de Recherche Petite Échelle Grande Échelle.
C3X	Plateforme d'évaluation des conséquences radiologiques de l'IRSN.

MOGREPS	Met Office Global and Regional Ensemble Prediction System.
PEARO	Prévision d'Ensemble AROME.
PEARP	Prévision d'Ensemble ARPEGE.
pX	Le modèle de dispersion à courte distance de l'IRSN.
SURFEX	SURFace EXternalisée.

Instruments et systèmes d'observations

ANTILOPE	ANalyse par spaTiaLisation hOraire des PrEcipitations.
INES	International Nuclear and radiological Event Scale
LB134	Compteur proportionnel de l'activité β , Berthold.
Lidar	LIght Detection And Ranging.
PTILH	Plateforme Technique Instrumentée de La Hague.
RADOME	Réseau d'observations météorologiques au sol de Météo-France.
SEMENCE	Réseau d'observations météorologiques sur les sites nucléaires en France.
Sodar	Sonic Detection And Ranging.

Abréviations

ACP	Analyse en Composantes Principales.
ADM	Atmospheric Dispersion Model.
CHA	Clustering Hiérarchique Ascendant.
CLA	Couche Limite Atmosphérique.
CRPS	Continuous Ranked Probability Score.
DISKRYNOC	DISpersion du KRYpton au Nord-Cotentin.
EPS	Ensemble Prediction System.
FMS	Figure of Merit in Space.
HCL	Hauteur de la Couche Limite.
NWP	Numerical Weather Prediction.

PNT	Prévision Numérique du Temps.
PSS	Peirce Skill Score.
RMSE	Root Mean Squared Error.
ROC	Relative Operating Characteristic.
RP	Reproccession Plant.
SPP	Stochastically Perturbed Parametrizations.
SPPT	Stochastically Perturbed Parametrization Tendencies.
URSS	Union des Républiques Socialistes Soviétiques.
UTC	Coordinated Universal Time.
3D-var	Méthode d'assimilation variationnelle à 3 dimensions.
4D-var	Méthode d'assimilation variationnelle à 4 dimensions.

Bibliographie

- Ahlswede, J., Hebel, S., Kalinowski, M. B., and Roß, J. O. (2009). *Update of the global krypton-85 emission inventory*. Carl-Friedrich-von-Weizsäcker-Zentrum für Naturwissenschaft und Friedensforsch. de Univ. Hamburg, Hamburg, Germany.
- Aleksovska, I. (2020). *Améliorer les prévisions à court et moyen termes des modèles agronomiques en prenant mieux en compte l'incertitude des prévisions météorologiques*. PhD thesis, Université de Toulouse.
- Aleksovska, I., Raynaud, L., Faivre, R., Brun, F., and Raynal, M. (2021). Design and evaluation of calibrated and seamless ensemble weather forecasts for crop protection applications. *Weather and Forecasting*, 36(4) :1329–1342.
- Anderson, J. L. (1996). A method for producing and evaluating probabilistic forecasts from ensemble model integrations. *Journal of climate*, 9(7) :1518–1530.
- Anwender, D., Harr, P. A., and Jones, S. C. (2008). Predictability associated with the downstream impacts of the extratropical transition of tropical cyclones : Case studies. *Monthly weather review*, 136(9) :3226–3247.
- Aoki, N. and Makide, Y. (2005). The concentration of krypton in the atmosphere—its revision after half a century—. *Chemistry Letters*, 34(10) :1396–1397.
- Argence, S., Lambert, D., Richard, E., Chaboureau, J.-P., and Söhne, N. (2008). Impact of initial condition uncertainties on the predictability of heavy rainfall in the mediterranean : A case study. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 134(636) :1775–1788.
- Arthur, D. and Vassilvitskii, S. (2007). K-means++ the advantages of careful seeding. In *Proceedings of the eighteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, pages 1027–1035.

- Aumond, P. (2011). *Modélisation numérique pour l'acoustique environnementale : simulation de champs météorologiques et intégration dans un modèle de propagation*. PhD thesis, Université du Maine.
- Avissar, R. and Liu, Y. (1996). Three-dimensional numerical study of shallow convective clouds and precipitation induced by land surface forcing. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 101(D3) :7499–7518.
- Baker, K. M. and Kirk, W. W. (2007). Comparative analysis of models integrating synoptic forecast data into potato late blight risk estimate systems. *Computers and electronics in agriculture*, 57(1) :23–32.
- Baklanov, A. and Sørensen, J. (2001). Parameterisation of radionuclide deposition in atmospheric long-range transport modelling. *Physics and Chemistry of the Earth, Part B : Hydrology, Oceans and Atmosphere*, 26(10) :787–799.
- Bauer, P., Thorpe, A., and Brunet, G. (2015). The quiet revolution of numerical weather prediction. *Nature*, 525(7567) :47–55.
- Benamrane, Y., Wybo, J.-L., and Armand, P. (2013). Chernobyl and fukushima nuclear accidents : what has changed in the use of atmospheric dispersion modeling? *Journal of Environmental Radioactivity*, 126 :239–252.
- Besse, P., MILHEM, H., Mestre, O., Dufour, A., and Peuch, V.-H. (2007). Comparaison de techniques de «data mining» pour l'adaptation statistique des prévisions d'ozone du modèle de chimie-transport mocage. *Pollution atmosphérique*, 49(195) :285–292.
- Bouttier, F. (2007). Arome, avenir de la prévision régionale. *La météorologie*, 2007(58) :12–20.
- Bouttier, F. and Buizza, R. (2018). La prévision d'ensemble. *La météorologie*, 2018(100) :29–36.
- Bouttier, F. and Courtier, P. (2002). *Data assimilation concepts and methods*. ECMWF.
- Bouttier, F. and Raynaud, L. (2018). Clustering and selection of boundary conditions for limited-area ensemble prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 144(717) :2381–2391.
- Bouttier, F., Raynaud, L., Nuissier, O., and Ménétrier, B. (2016). Sensitivity of the arome ensemble to initial and surface perturbations during hymex. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 142 :390–403.

- Bouttier, F., Vié, B., Nuissier, O., and Raynaud, L. (2012). Impact of stochastic physics in a convection-permitting ensemble. *Monthly Weather Review*, 140(11) :3706–3721.
- Brousseau, P., Berre, L., Bouttier, F., and Desroziers, G. (2011). Background-error covariances for a convective-scale data-assimilation system : Arome–france 3d-var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137(655) :409–422.
- Brousseau, P., Seity, Y., Ricard, D., and Léger, J. (2016). Improvement of the forecast of convective activity from the arome-france system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 142(699) :2231–2243.
- Buizza, R., Milleer, M., and Palmer, T. N. (1999). Stochastic representation of model uncertainties in the ecmwf ensemble prediction system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 125(560) :2887–2908.
- Buizza, R. and Palmer, T. N. (1995). The singular-vector structure of the atmospheric global circulation. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 52(9) :1434–1456.
- Carrassi, A., Bocquet, M., Bertino, L., and Evensen, G. (2018). Data assimilation in the geosciences : An overview of methods, issues, and perspectives. *Wiley Interdisciplinary Reviews : Climate Change*, 9(5) :e535.
- Celebi, M. E., Kingravi, H. A., and Vela, P. A. (2013). A comparative study of efficient initialization methods for the k-means clustering algorithm. *Expert systems with applications*, 40(1) :200–210.
- Charrois, L., Cosme, E., Dumont, M., Lafaysse, M., Morin, S., Libois, Q., and Picard, G. (2016). On the assimilation of optical reflectances and snow depth observations into a detailed snowpack model. *The Cryosphere*, 10(3) :1021–1038.
- Cheneka, B. R., Watson, S. J., and Basu, S. (2020). The impact of weather patterns on offshore wind power production. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 1618. IOP Publishing.
- Cheneka, B. R., Watson, S. J., and Basu, S. (2021). Associating synoptic-scale weather patterns with aggregated offshore wind power production and ramps. *Energies*, 14(13) :3903.
- Clare, M. C., Warder, S. C., Neal, R., Bhaskaran, B., and Piggott, M. D. (2023). An unsupervised learning approach for predicting wind farm power and downstream wakes using weather patterns. *arXiv preprint arXiv :2302.05886*.

- Connan, O., Leroy, C., Derkx, F., Maro, D., Hébert, D., Roupsard, P., and Rozet, M. (2011). Atmospheric dispersion of an elevated release in a rural environment : Comparison between field sf6 tracer measurements and computations of briggs and adms models. *Atmospheric environment*, 45(39) :7174–7183.
- Connan, O., Smith, K., Organo, C., Solier, L., Maro, D., and Hébert, D. (2013). Comparison of rimpuff, hysplit, adms atmospheric dispersion model outputs, using emergency response procedures, with 85kr measurements made in the vicinity of nuclear reprocessing plant. *Journal of Environmental Radioactivity*, 124 :266–277.
- Connan, O., Solier, L., Hébert, D., Maro, D., Lamotte, M., Voiseux, C., Laguionie, P., Cazimajou, O., Le Cavelier, S., Godinot, C., Morillon, M., Thomas, L., and Percot, S. (2014). Near-field krypton-85 measurements in stable meteorological conditions around the areva nc la Hague reprocessing plant : estimation of atmospheric transfer coefficients. *Journal of environmental radioactivity*, 137 :142–149.
- Connan, O., Solier, L., Hébert, D., and Bacon, G. (2010). Mesures expérimentales de krypton-85 à méso-échelle : perspectives quant à la validation de modèles opérationnels. Technical report, Rapport DEI/SECURE/10-054.
- Courtier, P., Freydier, C., Geleyn, J.-F., Rabier, F., and Rochas, M. (1991). The arpege project at meteo france. In *Seminar on Numerical Methods in Atmospheric Models, 9-13 September 1991*, volume II, pages 193–232, Shinfield Park, Reading. ECMWF, ECMWF.
- Courtier, P., Thépaut, J.-N., and Hollingsworth, A. (1994). A strategy for operational implementation of 4d-var, using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120(519) :1367–1387.
- Davoine, X. and Bocquet, M. (2007). Inverse modelling-based reconstruction of the chernobyl source term available for long-range transport. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(6) :1549–1564.
- De Meutter, P., Camps, J., Delcloo, A., Deconninck, B., and Termonia, P. (2016). On the capability to model the background and its uncertainty of ctbt-relevant radioxenon isotopes in europe by using ensemble dispersion modeling. *Journal of environmental radioactivity*, 164 :280–290.
- De Meutter, P. and Delcloo, A. (2022). Uncertainty quantification of atmospheric transport and dispersion modelling using ensembles for ctbt verification applications. *Journal of environmental radioactivity*, 250.

- Descamps, L., Labadie, C., Joly, A., Bazile, E., Arbogast, P., and Cébron, P. (2015). Pearp, the météo-france short-range ensemble prediction system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 141(690) :1671–1685.
- Dong, L., Wang, L., Khahro, S. F., Gao, S., and Liao, X. (2016). Wind power day-ahead prediction with cluster analysis of nwp. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 60 :1206–1212.
- Doury, A. (1976). Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l’atmosphère. Technical Report CEA-R-4270, CEA.
- Draxler, R., Arnold, D., Chino, M., Galmarini, S., Hort, M., Jones, A., Leadbetter, S., Malo, A., Maurer, C., Rolph, G., Saito, K., Servranckx, R., Shimbori, T., Solazzo, E., and Wotawa, G. (2015). World meteorological organization’s model simulations of the radionuclide dispersion and deposition from the fukushima daiichi nuclear power plant accident. *Journal of Environmental Radioactivity*, 139(139) :172—184.
- Duhanyan, N. and Roustan, Y. (2011). Below-cloud scavenging by rain of atmospheric gases and particulates. *Atmospheric Environment*, 45(39) :7201–7217.
- El-Quartassy, Y., Korsakissok, I., Plu, M., Connan, O., Descamps, L., and Raynaud, L. (2022). Combining short-range dispersion simulations with fine-scale meteorological ensembles : probabilistic indicators and evaluation during a 85 kr field campaign. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22(24) :15793–15816.
- Fereday, D., Knight, J., Scaife, A., Folland, C., and Philipp, A. (2008). Cluster analysis of north atlantic–european circulation types and links with tropical pacific sea surface temperatures. *Journal of Climate*, 21(15) :3687–3703.
- Forgy, E. (1965). Cluster analysis of multivariate data : efficiency versus interpretability of classifications : Aaas. *Biometric Soc.(WNAR), Mtg., Riverside, California*.
- Fortin, V., Abaza, M., Anctil, F., and Turcotte, R. (2014). Why should ensemble spread match the rmse of the ensemble mean ? *Journal of Hydrometeorology*, 15(4) :1708–1713.
- Girard, S., Korsakissok, I., and Mallet, V. (2014). Screening sensitivity analysis of a radionuclides atmospheric dispersion model applied to the fukushima disaster. *Atmospheric Environment*, 95 :490–500.
- Girard, S., Mallet, V., Korsakissok, I., and Mathieu, A. (2016). Emulation and sobol’ sensitivity analysis of an atmospheric dispersion model applied to the fukushima nuclear accident. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 121(7) :3484–3496.

- Gurriaran, R., Maro, D., Bouisset, P., Hebert, D., Leclerc, G., Mekhlouche, D., Rozet, M., and Solier, L. (2004). In situ metrology of 85kr plumes released by the cogema la Hague nuclear reprocessing plant. *Journal of environmental radioactivity*, 72(1-2) :137–144.
- Hally, A., Richard, E., Fresnay, S., and Lambert, D. (2014). Ensemble simulations with perturbed physical parametrizations : Pre-hymex case studies. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(683) :1900–1916.
- Heim, M., Fritsch, A., Schuh, A., Shore, A., and Thoennessen, M. (2010). Discovery of the krypton isotopes. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 96(4) :333–340.
- Hennig, C. (2015a). Clustering strategy and method selection. *arXiv preprint arXiv :1503.02059*.
- Hennig, C. (2015b). What are the true clusters? *Pattern Recognition Letters*, 64 :53–62.
- Hennig, C. (2019). Cluster validation by measurement of clustering characteristics relevant to the user. *Data analysis and applications 1 : Clustering and regression, modeling-estimating, forecasting and data mining*, 2 :1–24.
- Hersbach, H. (2000). Decomposition of the continuous ranked probability score for ensemble prediction systems. *Weather and Forecasting*, 15(5) :559–570.
- Hill, R., Taylor, J., Lowles, I., Emmerson, K., and Parker, T. (2005). A new model validation database for evaluating aermoc, nrpb r91 and adms using krypton-85 data from bnfl sellafeld. *International journal of environment and pollution*, 24(1-4) :75–87.
- Hirota, M., Nemoto, K., Wada, A., Igarashi, Y., Aoyama, M., Matsueda, H., Hirose, K., Sartorius, H., Schlosser, C., Schmid, S., et al. (2004). Spatial and temporal variations of atmospheric 85kr observed during 1995-2001 in Japan : Estimation of atmospheric 85kr inventory in the northern hemisphere. *Journal of radiation research*, 45(3) :405–413.
- Hotelling, H. (1933). Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal of educational psychology*, 24(6) :417.
- Jain, A. K., Murty, M. N., and Flynn, P. J. (1999). Data clustering : a review. *ACM computing surveys (CSUR)*, 31(3) :264–323.
- Johnson, S. C. (1967). Hierarchical clustering schemes. *Psychometrika*, 32(3) :241–254.
- Jones, A., Thomson, D., Hort, M., and Devenish, B. (2007). The u.k. met office’s next-generation atmospheric dispersion model, name iii. In Borrego, C. and Norman, A.-L., editors, *Air Pollution Modeling and Its Application XVII*, pages 580–589, Boston, MA. Springer US.

- Katcoff, S. and Rubinson, W. (1965). Yields of ^{85}Kr in thermal neutron fission of ^{235}U and ^{239}Pu . *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 27(7) :1447–1450.
- Kolmogorov, A. N. (1991). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, 434(1890) :9–13.
- Korsakissok, I. (2009). *Changements d'échelle en modélisation de la qualité de l'air et estimation des incertitudes associées*. PhD thesis, Université Paris-Est.
- Korsakissok, I., Didier, D., and Soulhac, L. (2019). Projet px, note de principe px v2. note technique irsn. Technical report, PSE-SANTE/SESUC/2019-00342 (available upon request at <http://www.irsn.fr/EN/Contact>).
- Korsakissok, I. and Mallet, V. (2009). Comparative study of gaussian dispersion formulas within the polyphemus platform : evaluation with prairie grass and kincaid experiments. *Journal of applied meteorology and climatology*, 48(12) :2459–2473.
- Korsakissok, I., Mathieu, A., and Didier, D. (2013). Atmospheric dispersion and ground deposition induced by the fukushima nuclear power plant accident : A local-scale simulation and sensitivity study. *Atmospheric environment*, 70 :267–279.
- Korsakissok, I., Périllat, R., Andronopoulos, S., Bedwell, P., Berge, E., Charnock, T., Geertsema, G., Gering, F., Hamburger, T., Klein, H., Leadbetter, S., Lind, O., Pazmandi, T., Rudas, C., Salbu, B., Sogachev, A., Syed, N., Rhomas, J., Ulimoe, M., De Vries, H., and Wellings, J. (2020). Uncertainty propagation in atmospheric dispersion models for radiological emergencies in the pre-and early release phase : summary of case studies. *Radioprotection*, 55(suppl. 1) :S57–S68.
- Kuhn, H. W. (1955). The hungarian method for the assignment problem. *Naval research logistics quarterly*, 2(1-2) :83–97.
- Kumpf, A., Tost, B., Baumgart, M., Riemer, M., Westermann, R., and Rautenhaus, M. (2017). Visualizing confidence in cluster-based ensemble weather forecast analyses. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, 24(1) :109–119.
- Lachkar, A., Ammor, O., and Rais, N. (2006). Détermination du nombre de classes par le principe du maximum d'entropie pour des classes en chevauchement. *Rapport de recherche. Universités de Meknès et de Fès, Maroc*.
- Lafaysse, M., Cluzet, B., Dumont, M., Lejeune, Y., Vionnet, V., and Morin, S. (2017). A multiphysical ensemble system of numerical snow modelling. *The Cryosphere*, 11(3) :1173–1198.

- Lahoz, W. A. and Schneider, P. (2014). Data assimilation : making sense of earth observation. *Frontiers in Environmental Science*, 2 :16.
- Lamotte, C., Guth, J., Marécal, V., Cussac, M., Hamer, P. D., Theys, N., and Schneider, P. (2021). Modeling study of the impact of so₂ volcanic passive emissions on the tropospheric sulfur budget. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21(14) :11379–11404.
- Laurantin, O. (2013). Antilope : hourly rainfall analysis over france merging radar and rain gauges data. In *Proceedings of the 11th International Precipitation Conference*, edited by : Leijnse, H. and Uijlenhoet, R., KNMI, Ede-Wageningen, the Netherlands, volume 30.
- Le, N. B. T., Korsakissok, I., Mallet, V., Périllat, R., and Mathieu, A. (2021). Uncertainty study on atmospheric dispersion simulations using meteorological ensembles with a monte carlo approach, applied to the fukushima nuclear accident. *Atmospheric Environment : X*, 10 :100112.
- Leadbetter, S. J., Hort, M. C., Jones, A. R., Webster, H. N., and Draxler, R. R. (2015). Sensitivity of the modelled deposition of caesium-137 from the fukushima dai-ichi nuclear power plant to the wet deposition parameterisation in name. *Journal of environmental radioactivity*, 139 :200–211.
- Leadbetter, S. J., Jones, A. R., and Hort, M. C. (2022). Assessing the value meteorological ensembles add to dispersion modelling using hypothetical releases. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 22(1) :577–596.
- Leith, C. E. (1974). Theoretical skill of monte carlo forecasts. *Monthly weather review*, 102(6) :409–418.
- Lemaire, V., Ismaili, O. A., and Cornuéjols, A. (2015). An initialization scheme for supervised k-means. In *2015 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*, pages 1–8. IEEE.
- Leroy, C. (2010). Dispersion atmosphérique en champ proche pour des rejets en hauteur sur un site de topographie complexe. Technical report, Rapport DEI/SECRE/10-011.
- Leroy, C., Maro, D., Hébert, D., Solier, L., Rozet, M., Le Cavalier, S., and Connan, O. (2010). A study of the atmospheric dispersion of a high release of krypton-85 above a complex coastal terrain, comparison with the predictions of gaussian models (briggs, doury, adms4). *Journal of environmental radioactivity*, 101(11) :937–944.

- Leutbecher, M., Lock, S.-J., Ollinaho, P., Lang, S. T., Balsamo, G., Bechtold, P., Bonavita, M., Christensen, H. M., Diamantakis, M., Dutra, E., et al. (2017). Stochastic representations of model uncertainties at ecmwf : State of the art and future vision. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 143(707) :2315–2339.
- Lisman, F., Abernathy, R., Foster Jr, R., and Maeck, W. (1971). Fission yields and branching ratios of ^{85}Kr in thermal neutron fission of ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu , and ^{241}Pu . *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 33(3) :643–649.
- Lloyd, S. (1982). Least squares quantization in pcm. *IEEE transactions on information theory*, 28(2) :129–137.
- Lorenz, E. N. (1963). Deterministic nonperiodic flow. *Journal of atmospheric sciences*, 20(2) :130–141.
- Lumley, J. and Panofsky, H. (1964). The structure of atmospheric turbulence. *Wiley-Interscience*, 19.
- Mallet, V., Quélo, D., Sportisse, B., Ahmed de Biasi, M., Debry, E., Korsakissok, I., Wu, L., Roustan, Y., Sartelet, K., Tombette, M., and Foudhil, H. (2007). Technical note : The air quality modeling system polyphemus. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(20) :5479–5487.
- Mallet, V. and Sportisse, B. (2006). Ensemble-based air quality forecasts : A multimodel approach applied to ozone. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 111(D18).
- Maro, D., Crabol, B., Germain, P., Baron, Y., Hebert, D., and Bouisset, P. (2002). A study of the near field atmospheric dispersion of emissions at height : comparison of gaussian plume models (doury, pasquill-briggs, caire) with krypton 85 measurements taken around la hague nuclear reprocessing plant. *Radioprotection*, 37(C1) :1277–1282.
- Masson, V., Le Moigne, P., Martin, E., Faroux, S., Alias, A., Alkama, R., Belamari, S., Barbu, A., Boone, A., Bouyssel, F., et al. (2013). The surfexv7. 2 land and ocean surface platform for coupled or offline simulation of earth surface variables and fluxes. *Geoscientific Model Development*, 6(4) :929–960.
- Matheson, J. E. and Winkler, R. L. (1976). Scoring rules for continuous probability distributions. *Management science*, 22(10) :1087–1096.
- Mathieu, A., Korsakissok, I., Quélo, D., Groëll, J., Tombette, M., Didier, D., Quentric, E., Saunier, O., Benoit, J.-P., and Isnard, O. (2012). Atmospheric dispersion and deposition of radionuclides from the fukushima daiichi nuclear power plant accident. *Elements*, 3(8) :195–200.

- McTaggart-Cowan, R., Separovic, L., Aider, R., Charron, M., Desgagné, M., Houtekamer, P. L., Paquin-Ricard, D., Vaillancourt, P. A., and Zadra, A. (2022). Using stochastically perturbed parameterizations to represent model uncertainty. part i : Implementation and parameter sensitivity. *Monthly Weather Review*, 150(11) :2829–2858.
- Monin, A. and Obukhov, A. M. (1959). *Basic Laws of Turbulent Mixing in the Ground Layer of the Atmosphere*. Akademia Nauk SSSP.
- Mounier, A. (2022). *Synthèse des prévisions d'ensemble par scénarios physiquement cohérents. Mise en pratique au moyen d'approches objets et d'apprentissage statistique*. PhD thesis, Université de Toulouse.
- Neal, R., Fereday, D., Crocker, R., and Comer, R. E. (2016). A flexible approach to defining weather patterns and their application in weather forecasting over europe. *Meteorological Applications*, 23(3) :389–400.
- Nichols, A., Verpelli, M., and Aldama, D. (2008). *Handbook of nuclear data for safeguards : database extensions, August 2008*. IAEA.
- Nicolas, J. and Craffe, F. (2003). La modélisation de la dispersion atmosphérique. cas particulier des odeurs. Technical report, Fondation Universitaire Luxembourgeoise, Arlon, Belgium.
- Olesen, H. (1998). Model validation kit - status and outlook. In *5th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes.(Rhodes)*. Interscience Publishers.
- Orano, I. H. (2018). Rapport annuel de surveillance de l'environnement du site orano la hague - Édition 2018. Technical report, Orano La Hague.
- Orano, I. H. (2020). Orano cycle-annual environment monitoring report of the orano la hague site-2020 edition. Technical report, Orano La Hague.
- Orano, I. H. (2021a). Rapport d'information du site orano la hague. Technical report, Orano La Hague.
- Orano, I. H. (2021b). Traitement des combustibles usés provenant de l'étranger dans les installations d'orano la hague-Édition 0221. Technical report, Orano, La Hague.
- Orlanski, I. (1975). A rational subdivision of scales for atmospheric processes. *Bulletin of the American Meteorological Society*, pages 527–530.

- Palmer, T. N., Buizza, R., Doblas-Reyes, F., Jung, T., Leutbecher, M., Shutts, G. J., Steinheimer, M., and Weisheimer, A. (2009). Stochastic parametrization and model uncertainty. Technical Report 598, ECMWF Reading, UK.
- Panofsky, H. A. and Dutton, J. A. (1984). Atmospheric turbulence. models and methods for engineering applications. *New York : Wiley*.
- Pasquill, F. (1961). The estimation of the dispersion of windborne material. *Met. Mag.*, 90 :33.
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., et al. (2011). Scikit-learn : Machine learning in python. *the Journal of machine Learning research*, 12 :2825–2830.
- Pérrillat, R., Korsakissok, I., Mallet, V., Mathieu, A., Sekiyama, T., Kajino, M., Adachi, K., Igarashi, Y., Maki, T., and Didier, D. (2016). Using meteorological ensembles for atmospheric dispersion modeling of the fukushima nuclear accident. In *Proceedings of the 17th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*.
- Perkins, R., Soulhac, L., Mejean, P., and Rios, I. (2005). Modélisation de la dispersion des émissions atmosphériques d’un site industriel—vers un guide de l’utilisateur. Technical report, Technical report, LMFA-Ecole Centrale de Lyon.
- Peterson, J., MacDonell, M., Haroun, L., Monette, F., Hildebrand, R. D., and Taboas, A. (2007). Radiological and chemical fact sheets to support health risk analyses for contaminated areas. *Argonne National Laboratory Environmental Science Division*, 133 :40–41.
- Pérrillat, R. (2022). Classification de cartes de décisions pour des contextes opérationnels de crise nucléaire. Technical Report RT-PMFIP-01598-005A, PHIMECA.
- Quélo, D., Krysta, M., Bocquet, M., Isnard, O., Minier, Y., and Sportisse, B. (2007). Validation of the polyphemus platform on the etex, chernobyl and algeciras cases. *Atmospheric Environment*, 41(26) :5300–5315.
- Quérel, A., Meddouni, K., Quélo, D., Doursout, T., and Chuzel, S. (2022). Statistical approach to assess radon-222 long-range atmospheric transport modelling and its associated gamma dose rate peaks. *Advances in Geosciences*, 57 :109–124.
- Rand, W. M. (1971). Objective criteria for the evaluation of clustering methods. *Journal of the American Statistical association*, 66(336) :846–850.

- Rao, K. S. (2005). Uncertainty analysis in atmospheric dispersion modeling. *Pure and applied geophysics*, 162(10) :1893–1917.
- Raynaud, L., Berre, L., and Desroziers, G. (2012). Accounting for model error in the météo-france ensemble data assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 138(662) :249–262.
- Raynaud, L. and Bouttier, F. (2016). Comparison of initial perturbation methods for ensemble prediction at convective scale. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 142(695) :854–866.
- Roberts, O. (1923). The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 104(728) :640–654.
- Rouil, L., Honoré, C., Vautard, R., Beekmann, M., Bessagnet, B., Malherbe, L., Meleux, F., D., A., Elichegaray, C., Flaud, J.-M., Menut, L., Martin, D., Peuch, A., Peuch, V.-H., and Poisson, N. (2009). Prev'air : An operational forecasting and mapping system for air quality in europe. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 90(1) :73–84.
- Rousseeuw, P. J. (1987). Silhouettes : a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *Journal of computational and applied mathematics*, 20 :53–65.
- Rózański, K. (1979). Krypton-85 in the atmosphere 1950–1977 : a data review. *Environment International*, 2(3) :139–143.
- Saunier, O., Didier, D., Mathieu, A., Masson, O., and Brazidec, J. D. L. (2019). Atmospheric modeling and source reconstruction of radioactive ruthenium from an undeclared major release in 2017. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(50) :24991–25000.
- Saunier, O., Korsakissok, I., Didier, D., Doursout, T., and Mathieu, A. (2020). Real-time use of inverse modeling techniques to assess the atmospheric accidental release of a nuclear power plant. *Radioprotection*, 55 :107–115.
- Saunier, O., Mathieu, A., Didier, D., Tombette, M., Quélo, D., Winiarek, V., and Bocquet, M. (2013). An inverse modeling method to assess the source term of the fukushima nuclear power plant accident using gamma dose rate observations. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 13(22) :11403–11421.
- Sehmel, G. A. (1980). Particle and gas dry deposition : a review. *Atmospheric Environment (1967)*, 14(9) :983–1011.

- Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N. (1998). Atmospheric chemistry and physics : from air pollution to climate change. *Wiley-Interscience*, 40 :1326.
- Seity, Y., Brousseau, P., Malardel, S., Hello, G., Bénard, P., Bouttier, F., Lac, C., and Masson, V. (2011). The arome-france convective-scale operational model. *Monthly Weather Review*, 139(3) :976–991.
- Siméon, J. (2006). Fondamentaux de météorologie : À l'école du temps-par sylvie malardel. *La Météorologie*, 2006(52) :53–53.
- Sørensen, J. H., Amstrup, B., Feddersen, H., Bartnicki, J., Klein, H., Simonsen, M., Lauritzen, B., Hoe, S., Israelson, C., and Lindgren, J. (2016). Fukushima accident : uncertainty of atmospheric dispersion modelling (FAUNA). Technical Report 360, Nordic Nuclear Safety Research.
- Soulhac, L. (2002). Etude préliminaire concernant l'utilisation de méthodes inverses appliquées aux calculs de conséquences dans l'environnement : impact des phénomènes non pris en compte par le modèle sirocco. Technical report, LMFA – UMR 5509 CNRS / ECL / UCB.
- Soulhac, L. and Didier, D. (2008). Projet px, note de principe px 1.0. note technique irsn. Technical report, DEI/SESUC/08-39 (available upon request at <http://www.irsn.fr/EN/Contact>).
- Sportisse, B. (2007). A review of parameterizations for modelling dry deposition and scavenging of radionuclides. *Atmospheric Environment*, 41(13) :2683–2698.
- Stein, A. F., Draxler, R. R., Rolph, G. D., Stunder, B. J. B., Cohen, M. D., and Ngan, F. (2015). Noaa's hysplit atmospheric transport and dispersion modeling system. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 96(12) :2059–2077.
- Stohl, A., Forster, C., Frank, A., Seibert, P., and Wotawa, G. (2005). Technical note : The lagrangian particle dispersion model flexpart version 6.2. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 5(9) :2461–2474.
- Stohl, A., Seibert, P., Wotawa, G., Arnold, D., Burkhart, J. F., Eckhardt, S., Tapia, C., Vargas, A., and Yasunari, T. J. (2012). Xenon-133 and caesium-137 releases into the atmosphere from the fukushima dai-ichi nuclear power plant : determination of the source term, atmospheric dispersion, and deposition. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(5) :2313–2343.

- Straume, A. G., Koffi, E. N., and Nodop, K. (1998). Dispersion modeling using ensemble forecasts compared to etex measurements. *Journal of Applied Meteorology*, 37(11) :1444–1456.
- Stull, R. B. (1988). *An introduction to boundary layer meteorology*, volume 13. Springer Science & Business Media.
- Talagrand, O. (1999). Evaluation of probabilistic prediction systems. In *Workshop Proceedings" Workshop on Predictability", 20-22 October 1997, ECMWF, Reading, UK*.
- Tamura, Y., Suda, K., Sasaki, A., Iwatani, Y., Fujii, K., Ishibashi, R., and Hibi, K. (2001). Simultaneous measurements of wind speed profiles at two sites using doppler sodars. *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 89(3-4) :325–335.
- Taylor, G. I. (1922). Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-20(1) :196–212.
- Tempest, K. I., Craig, G. C., and Brehmer, J. R. (2023). Convergence of forecast distributions in a 100,000-member idealised convective-scale ensemble. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 149(752) :677–702.
- Ternon, J.-F. (1990). *Mise au point de la mesure du krypton-85 dans des échantillons océaniques par comptage beta, et utilisation du krypton-85 comme traceur en océanographie*. PhD thesis, Paris 6.
- Tomas, J. M., Peereboom, V., Kloosterman, A., and van Dijk, A. (2021). Detection of radioactivity of unknown origin : Protective actions based on inverse modelling. *Journal of environmental radioactivity*, 235 :106643.
- Tombette, M., Quentric, E., Quélo, D., Benoit, J., Mathieu, A., Korsakissok, I., and Didier, D. (2014). C3X : A software platform for assessing the consequences of an accidental release of radioactivity into the atmosphere. In *International Radiation Protection Association congress, Geneva*.
- Toth, Z. and Kalnay, E. (1993). Ensemble forecasting at nmc : The generation of perturbations. *Bulletin of the american meteorological society*, 74(12) :2317–2330.
- Trnka, M., Olesen, J. E., Kersebaum, K., Skjelvåg, A., Eitzinger, J., Seguin, B., PELTONEN-SAINIO, P., Rötter, R., Iglesias, A., Orlandini, S., et al. (2011). Agroclimatic conditions in europe under climate change. *Global Change Biology*, 17(7) :2298–2318.

- Turner, D. B. (1969). *Workbook of atmospheric dispersion estimates : an introduction to dispersion modeling*. CRC press.
- UNSCEAR, , WHO, et al. (2008). Chernobyl : Looking back to go forward. proceedings of an international conference.
- Vendel, F. (2011). *Modélisation de la dispersion atmosphérique en présence d'obstacles complexes : application à l'étude de sites industriels*. PhD thesis, Université de Lyon.
- Von Luxburg, U., Williamson, R. C., and Guyon, I. (2012). Clustering : Science or art ? In *Proceedings of ICML workshop on unsupervised and transfer learning*, pages 65–79. JMLR Workshop and Conference Proceedings.
- Wastl, C., Wang, Y., Atencia, A., and Wittmann, C. (2019). A hybrid stochastically perturbed parametrization scheme in a convection-permitting ensemble. *Monthly Weather Review*, 147(6) :2217–2230.
- Werner, C. (2005). Doppler wind lidar. In *Lidar*, pages 325–354. Springer.
- Whitaker, J. S. and Lough, A. F. (1998). The relationship between ensemble spread and ensemble mean skill. *Monthly weather review*, 126(12) :3292–3302.
- WHO et al. (2013). Health risk assessment from the nuclear accident after the 2011 great east japan earthquake and tsunami, based on a preliminary dose estimation.
- Wilcoxon, F., Katti, S., Wilcox, R. A., et al. (1963). *Critical values and probability levels for the Wilcoxon rank sum test and the Wilcoxon signed rank test*, volume 1. American Cyanamid Pearl River (NY).
- Wimmer, M. (2021). *Représentation de l'erreur de modélisation dans le système de prévision d'ensemble régional PEARO*. PhD thesis, Université de Toulouse.
- Winger, K., Feichter, J., Kalinowski, M., Sartorius, H., and Schlosser, C. (2005). A new compilation of the atmospheric 85krypton inventories from 1945 to 2000 and its evaluation in a global transport model. *Journal of environmental radioactivity*, 80(2) :183–215.
- Wu, S., Sun, K., Dai, G., Wang, X., Liu, X., Liu, B., Song, X., Reitebuch, O., Li, R., Yin, J., et al. (2022). Inter-comparison of wind measurements in the atmospheric boundary layer and the lower troposphere with aeolus and a ground-based coherent doppler lidar network over china. *Atmospheric Measurement Techniques*, 15(1) :131–148.
- Zamo, M., Mestre, O., Arbogast, P., and Pannekoucke, O. (2014a). A benchmark of statistical regression methods for short-term forecasting of photovoltaic electricity production, part i : Deterministic forecast of hourly production. *Solar Energy*, 105 :792–803.

- Zamo, M., Mestre, O., Arbogast, P., and Pannekoucke, O. (2014b). A benchmark of statistical regression methods for short-term forecasting of photovoltaic electricity production. part ii : Probabilistic forecast of daily production. *Solar Energy*, 105 :804–816.
- Zhuang, S., Fang, S., Dong, X., Xu, Y., Sheng, L., and Li, X. (2023). Local atmospheric transport behaviors of representative radionuclides during the fukushima accident : A 200-m-resolution cross-scale study from site to 20 km. *Journal of Environmental Radioactivity*, 265 :107212.

Vers l'utilisation d'ensembles météorologiques pour la dispersion à courte distance de radionucléides en cas de rejets accidentels dans l'atmosphère : propagation des incertitudes et comparaison à des mesures radiologiques dans l'environnement

Doctorat de l'université de Toulouse III – Paul Sabatier

Soutenue le 08/12/2023

Résumé — Les modèles de dispersion atmosphérique sont utilisés lors d'un rejet accidentel de radionucléides dans l'atmosphère pour appuyer la gestion de crise, pour prévoir la dose susceptible d'être reçue par les populations lors du passage du panache des radionucléides rejetés dans l'atmosphère et recommander des actions de protection des populations aux autorités. Cependant, il est indispensable de prendre en compte les incertitudes inhérentes à ces simulations. L'une des sources de ces incertitudes est la météorologie utilisée pour alimenter les modèles. Ce travail de thèse vise à explorer l'intérêt potentiel de la modélisation d'ensemble dans le cas de la dispersion des radionucléides à l'échelle locale, suite à un rejet accidentel. La propagation des incertitudes météorologiques dans les simulations de dispersion est ainsi caractérisée à travers un cas d'étude original, combinant un jeu de données de terrain (terme source réel et connu, et observations dans l'environnement récentes et continues) et une méthodologie innovante, qui tient compte des contraintes opérationnelles de l'utilisation des prévisions météorologiques probabilistes en situation d'urgence radiologique.

Mots clés : Modélisation d'ensemble, ^{85}Kr , Couche limite atmosphérique, Dispersion turbulente, PEARO-pX, DISKRYNOC.

Auteur : Youness El-Ouartassy^{1,2}

Directeur de thèse : Matthieu Plu¹

Co-directrice de thèse : Irène Korsakissok²

¹Centre National de Recherches Météorologiques, Météo-France, Université de Toulouse, CNRS, Toulouse, France

²Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire (IRSN), PSE-SANTE/SESUC/BMCA, Fontenay-aux-Roses, France