



**HAL**  
open science

# Modélisation inverse pour la dispersion atmosphérique de polluants suite à un incendie de grande ampleur à l'échelle urbaine

Emilie Launay

► **To cite this version:**

Emilie Launay. Modélisation inverse pour la dispersion atmosphérique de polluants suite à un incendie de grande ampleur à l'échelle urbaine. Ingénierie de l'environnement. École des Ponts ParisTech, 2023. Français. NNT : 2023ENPC0047 . tel-04579417

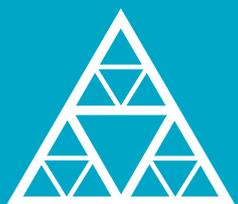
**HAL Id: tel-04579417**

**<https://pastel.hal.science/tel-04579417>**

Submitted on 17 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.



École des Ponts  
ParisTech



THÈSE DE DOCTORAT  
de l'École des Ponts ParisTech

## Modélisation inverse pour la dispersion atmosphérique de polluants suite à un incendie de grande ampleur à l'échelle urbaine

École doctorale N°531, Sciences, Ingénierie et Environnement

Météorologie, océanographie physique et physique de l'environnement

Thèse préparée au Laboratoire Central de la Préfecture de Police (LCPP) et au Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREA)

Thèse soutenue le 20 décembre 2023, par  
**Émilie Launay**

Composition du jury :

Cathy, CLERBAUX Directrice de recherche, LATMOS	<i>Rapporteuse</i>
Olivier, THUAL Professeur émérite, Toulouse INP	<i>Rapporteur</i>
Didier, LUCOR Directeur de recherche, LISN	<i>Examineur</i>
Mélanie, ROCHOUX Directrice de recherche, CERFACS	<i>Examinatrice</i>
Gilles, FORET Maître de conférences, LISA	<i>Examineur</i>
Yelva, ROUSTAN Chargé de recherche, ENPC	<i>Directeur de thèse</i>
Virginie, HERGAULT Ingénieure, LCPP	<i>Co-encadrante</i>
Marc, BOCQUET Directeur de recherche, ENPC	<i>Co-encadrant</i>
Joffrey, DUMONT LE BRAZIDEC Chargé de recherche, ENPC	<i>Invité</i>



## Résumé

Les incendies de grande ampleur survenus en milieu urbain, tels que ceux de l'usine Lubrizol ou de la cathédrale Notre-Dame de Paris en 2019 en France, mettent en évidence la nécessité de développer des moyens d'évaluation des risques engendrés par les panaches de fumées pour la population et l'environnement. L'un des enjeux est de fournir rapidement aux autorités des informations sur les zones impactées par le panache et les niveaux de concentration de polluants auxquels les personnes ont pu être exposées.

La modélisation de la dispersion atmosphérique est une méthode utilisée pour évaluer la propagation des concentrations de polluants dans l'atmosphère. En particulier, la simulation de la dispersion des substances toxiques issues d'un rejet ponctuel peut permettre d'orienter des stratégies de prélèvements. Pour les incendies, les caractéristiques de la source polluante peuvent être déterminées au moyen de corrélations qui dépendent des propriétés thermocinétiques du feu. Cependant, en cas de rejet accidentel, les émissions sont a priori inconnues et les simulations visant à analyser le comportement du panache de fumées sont alors réalisées avec des hypothèses et des incertitudes importantes. Si l'on dispose de mesures de concentrations dans l'atmosphère, il devient intéressant de mettre en œuvre une approche de modélisation inverse basée sur l'utilisation conjointe de ces mesures et d'un modèle de dispersion. Deux méthodes basées sur le cadre de la modélisation inverse bayésienne sont développées pour retrouver le terme source d'un incendie de grande ampleur par l'assimilation de mesures de concentration de polluants in-situ. Une méthode semi-bayésienne et une méthode bayésienne de type Monte Carlo par chaîne de Markov sont considérées pour la caractérisation du rejet. La source à retrouver est décrite par un taux d'émission variable dans le temps et une hauteur d'émission. Cette dernière, liée au phénomène d'élévation du panache, est un paramètre important pour évaluer l'impact de la pollution à proximité de l'incendie. Deux stratégies de paramétrisation des hauteurs d'émission sont développées. La première consiste à retrouver les taux de rejet pour toutes les hauteurs d'émission prédéfinies depuis la modélisation directe. La seconde est une proposition d'inversion qui consiste à inverser la hauteur d'émission pour obtenir une intensité de rejet associée. En outre, plusieurs ajustements des méthodes inverses sont proposés pour les rendre plus robustes, notamment avec la caractérisation des niveaux de pollution ambiants.

Ces méthodes inverses sont appliquées dans le cadre d'une expérience de simulation d'un système d'observation ("OSSE") correspondant à l'incendie de la cathédrale Notre-Dame en 2019 et d'une étude de cas réel correspondant à l'incendie d'un grand entrepôt à Aubervilliers, près de Paris, en 2021.

## Abstract

Past large-scale fires in urban areas, such as the Lubrizol warehouse fire or the Notre-Dame de Paris cathedral fire in France in 2019, have highlighted the need to develop means of assessing the risks posed by smoke plumes to the population and the environment. One of the challenges is to quickly provide the authorities with information on the areas impacted by the plume and the pollutant concentration levels to which people may have been exposed.

Atmospheric dispersion modelling is a method used to assess the spread of pollutant concentrations in the atmosphere. By simulating the dispersion of toxic substances from accidental releases, it is possible to guide sampling strategies. For fires, the characteristics of the pollutant source can be determined using correlations depending on the thermokinetic properties of the fire. However, in the event of an accidental release, the emissions are a priori unknown, and simulations designed to analyse the behaviour of the smoke plume are then carried out with significant assumptions and uncertainties. If atmospheric concentration measurements are available, it is worth using an inverse modelling approach based on the joint use of these measurements and a dispersion model. Two methods based on the Bayesian inverse modelling framework are developed to find the source term of a large-scale fire, by assimilating in-situ pollutant concentration measurements. A semi-Bayesian method and a Markov Chain Monte Carlo Bayesian method are considered for the characterisation of the release. The source to be retrieved is described by a time-varying emission rate and an emission height. The latter, linked to the phenomenon of plume rise, is an important parameter for assessing the pollution impact in the vicinity of the fire. Two emission heights parametrisation strategies are studied. The first consists of finding the distributions associated with the release rates for all the predefined emission heights from forward modelling. The second is an inversion proposal, which involves inverting the emission height to obtain an associated release intensity. Moreover, several adjustments to inverse methods are proposed to make them more robust, particularly with regard to the characterisation of ambient pollution levels.

These inverse methods are being applied in an Observation System Simulation Experiment (OSSE) corresponding to the Notre-Dame Cathedral fire in 2019 and a real case study corresponding to a large warehouse fire in Aubervilliers, near Paris, in 2021.



# Remerciements

Je tiens d'abord à remercier les personnes qui m'ont fait l'honneur d'accepter de faire partie de mon jury de thèse. Je leur suis reconnaissante pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Je remercie en particulier les rapporteurs Cathy Clerboux et Olivier Thual pour la lecture minutieuse du manuscrit. Je remercie les examinateurs Mélanie Rochoux et Gilles Forêt d'avoir également accepté de faire partie de mon comité de suivi individuel de thèse. Je remercie également le président du jury Didier Lucor pour les mots qu'il a prononcés lors de la soutenance de thèse.

Je tiens à remercier tout particulièrement mon directeur de thèse Yelva Roustan pour sa contribution à ce travail et pour tous ses conseils. Je remercie également Marc Bocquet et Joffrey Dumont Le Brazidec pour avoir accepté de faire partie de mon encadrement de thèse, en particulier en m'initiant aux différentes facettes des méthodes inverses. Je dois également beaucoup à mon encadrante Virginie Hergault du Laboratoire Central de la Préfecture de Police, qui a contribué à améliorer mon travail en relisant mes écrits et en prodiguant des conseils pertinents jusqu'à la soutenance. Je remercie l'ensemble de l'équipe encadrante pour avoir stimulé cette thèse par leurs idées, leur rigueur et leur savoir.

Je souhaiterais adresser des remerciements à tous mes collègues, avec qui j'ai été très heureuse de partager ces trois années entre le Laboratoire Central de la Préfecture de Police et le Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique. En particulier, au LCPP, je souhaiterais remercier Thomas et toute l'équipe Modélisation, Étude et Expérimentation, Chrystelle et toute l'équipe Intervention Prélèvement Pollution avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à discuter, aussi bien de physique que de contraintes opérationnelles. Je remercie également Insaf, Etienne, Giacomo et Louis avec qui j'ai apprécié échanger autour de nombreux cafés. Au CERE, je suis très heureuse d'avoir eu l'opportunité de rencontrer Alexis, Charlotte, Marjolaine, Alice, Guilhem, Maxence, Lya, Pierre, Oscar, Victor, Clémentine, Aurélie, Martin, Yunyi, Daphnée, Youngseob, Karine, Alban, Tobias, Patrick et Lydie.

Pour finir, je souhaite remercier mon entourage en particulier pour leur soutien lors de la rédaction du manuscrit. À ma mère, à mes frères, à Manon, Inès et Kévin pour m'avoir encouragée il y a maintenant trois ans à m'engager dans cette thèse, à Louis, Bastien, Myriam, Flavie, Louise, Gaël et Jane pour m'avoir soutenue dans mes projets depuis la fac, et à Anouk, Camille, Jessica, Quirlène et Typhaine de m'avoir soutenue tout au long du doctorat.

Enfin, un immense merci à tous ceux qui ont pu assister à la soutenance et m'encourager depuis leurs écrans, et à ceux que je n'ai pas cités mais qui m'ont accompagnée pendant ces trois ans!



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>6</b>
<b>1 Caractérisation d'un terme source pour l'incendie</b>	<b>10</b>
1.1 Caractérisation des incendies	11
1.1.1 Description par la puissance	11
1.1.2 Corrélation liée à la hauteur de flamme	12
1.1.3 Modélisation d'incendies	13
1.2 Caractérisation des fumées d'incendies	13
1.2.1 Substances polluantes	14
1.2.2 Caractéristiques des fumées	15
1.3 Phénomène de surhauteur	19
1.3.1 Surhauteur et couche d'inversion	20
1.3.2 Modèles de surhauteur	20
1.4 Application à l'incendie de Notre Dame de Paris	23
1.4.1 Contexte et scénario	23
1.4.2 Estimation de la hauteur effective	24
Synthèse	27
<b>2 Dispersion atmosphérique de fumées d'incendie</b>	<b>28</b>
2.1 Phénoménologie	28
2.1.1 Structure atmosphérique	29
2.1.2 Advection-diffusion	31
2.1.3 Processus de perte	34
2.2 Modélisation de la dispersion atmosphérique	36
2.2.1 Ajustement de l'écoulement	37
2.2.2 Dispersion lagrangienne	39
2.2.3 Processus de perte	42
2.3 Application à l'incendie de Notre-Dame de Paris	45
Synthèse	48
<b>3 Modélisation inverse d'un terme source</b>	<b>49</b>
3.1 Cadre de la modélisation inverse	50
3.2 Méthode du maximum <i>a posteriori</i>	52
3.2.1 Cadre variationnel	53
3.2.2 Cadre semi-bayésien	56
3.3 Méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov	59
3.3.1 Description de la méthode	59
3.3.2 Algorithme de Metropolis-Hastings	59
3.4 Application à l'incendie de Notre Dame de Paris	61

3.4.1	Génération de données synthétiques . . . . .	61
3.4.2	Configuration d'inversion . . . . .	66
3.4.3	Résultats numériques . . . . .	67
	Synthèse . . . . .	73
<b>4</b>	<b>Application à un incendie d'entrepôt de grande ampleur</b>	<b>75</b>
4.1	Bayesian inversion of emissions from large urban fire using in situ observations . . . . .	76
4.1.1	Fire of interest . . . . .	76
4.1.2	Methodology . . . . .	78
4.1.3	Numerical experiments . . . . .	82
4.1.4	Conclusions . . . . .	93
4.2	Analyse de sensibilité à la vitesse de dépôt sec . . . . .	94
4.3	Analyse des corrélations incendie . . . . .	98
	<b>Conclusions et perspectives</b>	<b>102</b>
	<b>Nomenclature</b>	<b>113</b>
<b>A</b>	<b>Annexe du chapitre 1</b>	<b>117</b>
A.1	Analyse de sensibilité . . . . .	117
<b>B</b>	<b>Annexe du chapitre 2</b>	<b>119</b>
B.1	Classe de stabilité de Pasquill . . . . .	119
B.2	Modélisation du lessivage . . . . .	120
<b>C</b>	<b>Annexe du chapitre 3</b>	<b>121</b>
C.1	Analyse de sensibilité avec erreur modèle . . . . .	121
<b>D</b>	<b>Annexe du chapitre 4</b>	<b>123</b>
D.1	MCMC method . . . . .	123
D.2	Statistical indicators . . . . .	124

# Introduction

Les incendies de la cathédrale de Notre-Dame de Paris et de l'usine Lubrizol à Rouen en 2019, ainsi que le précédent en 2013, où une odeur de mercaptan a été détectée jusqu'à Paris, ont mis en évidence le besoin de mettre en place des outils opérationnels permettant de prendre en compte l'impact sanitaire et environnemental lié à la toxicité des fumées. Pour l'incendie de Notre-Dame, des études menées sur la composition des fumées ont révélé la présence de particules de plomb initialement présent dans la structure de la cathédrale (INERIS, 2019; Roux et al., 2023). Un rapport sanitaire publié par l'Agence Régionale de Santé (ARS, 2019) a alerté la population sur des risques de plombémie élevée suite à l'exposition au plomb après l'incendie de la cathédrale (van Geen et al., 2020). La dispersion des fumées s'est effectuée jusqu'à au moins 40 km de Paris, où une station de surveillance d'AirParif a enregistré des niveaux de concentration en plomb inhabituels au cours de la semaine du 15 au 22 avril 2019 (INERIS, 2019). Outre le cas de la cathédrale de Notre-Dame, les incendies de grande ampleur de quelques heures à quelques jours sont susceptibles d'émettre des quantités importantes de composés gazeux et particulaires dans l'atmosphère et peuvent provoquer une pollution jusqu'à plusieurs dizaines de kilomètres de distance.

Les acteurs en charge de la réponse de sécurité civile lors de ces événements soulignent un manque de visibilité de l'ampleur d'un sinistre en situation opérationnelle (Benamrane, 2015), en particulier pour les urgences NRBC-E (Nucléaire, Radiologique, Biologique, Chimique, Explosif), mais également pour les incendies comme ceux de l'usine Lubrizol en 2013 et 2019. L'accent est mis sur la nécessité de développer des systèmes d'aide à la décision ou *Decision-Support Systems* (DSS) robustes pour les responsables chargés de répondre aux risques de propagation de substances toxiques (Benamrane and Boustras, 2015; Bonazountas et al., 2007; French et al., 2017; Rouïl et al., 2021). L'un des enjeux est de fournir rapidement aux autorités des informations sur les zones impactées par le panache et les niveaux de concentration de polluants auxquels les personnes ont pu être exposées, *a fortiori* dans les zones urbaines densément peuplées. Une appréhension de la spatialité et de la dynamique de l'événement permet l'estimation des périmètres ou zones impactées et ainsi une mise en application d'actions de protection tels que la mise à l'abri ou l'évacuation.

Aujourd'hui, des services d'urgence disposent d'équipes spécialisées en Risques Chimiques (RCH) qui peuvent être mobilisés pour répondre à ce type d'événement. Ces équipes sont chargées d'identifier l'incident ou l'accident chimique et d'éliminer le risque ou d'en limiter les effets. Dans la région Île-de-France, le Laboratoire Central de la Préfecture de Police (LCPP) apporte un support à la Brigade des Sapeurs Pompiers de Paris (BSPP) en effectuant des mesures de concentration et de dépôts dans des établissements sensibles tels que des écoles et des hôpitaux. En 2021 et 2022, près de 20 interventions LCPP ont été recensées (cf. figure 1) pour l'estimation de la pollution d'incendies.

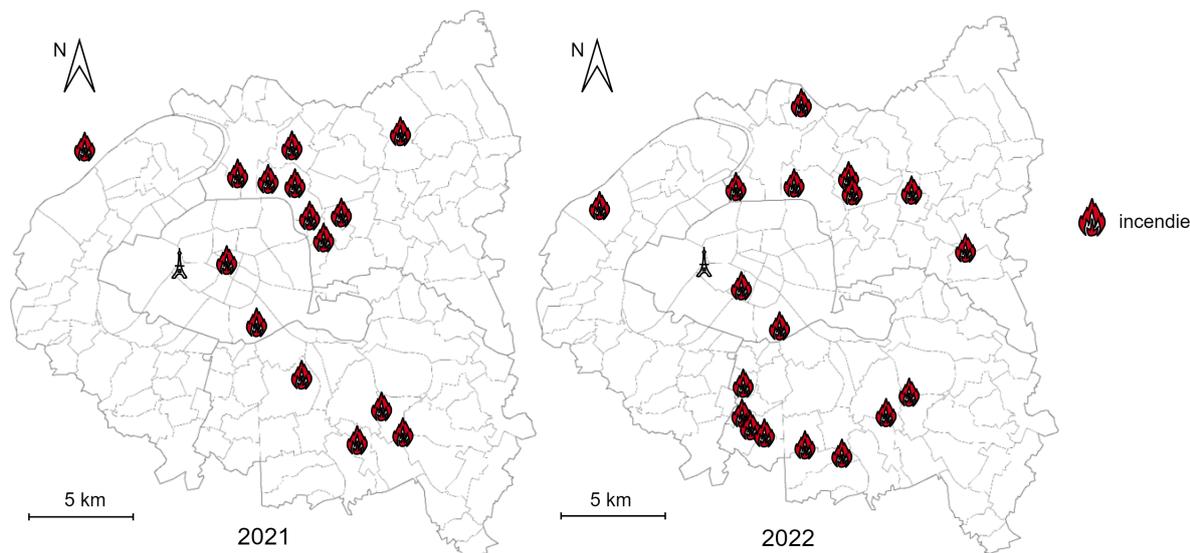


Figure 1 – Bilan annuel du support LCPP dans le cadre d’une stratégie de prélèvement pour l’estimation de la pollution d’incendies dans la région Île-de-France.

L’estimation des zones impactées par un panache de fumée et l’évaluation des conséquences sanitaires et environnementales des retombées de substances polluantes sont complexes. La modélisation de la dispersion atmosphérique de toxiques peut permettre d’orienter une stratégie de prélèvement et d’estimer les zones impactées par les fumées d’incendie. La simulation numérique de l’écoulement atmosphérique et de la dispersion de polluants en milieu urbain peut être réalisée à l’aide d’une large gamme d’outils de modélisation. La méthode proposée dans ce travail, destinée à être utilisée dans un cadre opérationnel (par exemple dans Gariazzo et al., 2014; Soulhac et al., 2016; Trini Castelli et al., 2018), s’appuie sur un outil de modélisation appartenant à la catégorie des approches de modélisation simplifiée.

La modélisation de la dispersion atmosphérique nécessite une connaissance *a priori* de la source polluante dans l’objectif d’évaluer les niveaux de concentrations dans un domaine d’intérêt. Cette source peut être estimée à partir de la nature et de la quantité des stocks dans les bâtiments dans la mesure où ces données sont disponibles. La directive “Seveso” (Laurent et al., 2021; Swuste and Reniers, 2017) impose aux États membres de l’Union Européenne l’identification des sites industriels présentant des risques d’accidents majeurs, de les classer sous le nom de “sites Seveso” et d’y maintenir un niveau élevé de prévention. Plus récemment, suite à l’incendie de l’usine Lubrizol à Rouen en 2019, de nouvelles recommandations sont parues (Legifrance, 2020a,b). En particulier, l’objectif est de rendre obligatoire la tenue des inventaires des produits stockés par les exploitants sur leur site afin qu’ils puissent être transmis sans délai aux pouvoirs publics en cas d’incident ou d’accident. Cependant, de nombreux incendies de grande ampleur surviennent dans des entrepôts non classés. De plus, la source polluante à modéliser est par définition mal caractérisée : le scénario d’incendie dépend fortement des conditions de combustion et de données souvent non disponibles, en particulier le taux de production d’un polluant dans les fumées d’incendies est mal connu.

La stratégie que vise à mettre en œuvre le LCPP est, à terme, de pouvoir déployer pendant un incendie un nombre limité de dispositifs de mesure de polluants, traceurs des fumées de combustion, sur des points cibles permettant, par modélisation inverse, de remonter à une caractérisation de la source. Cette stratégie est illustrée dans la figure 2, où l’application d’un

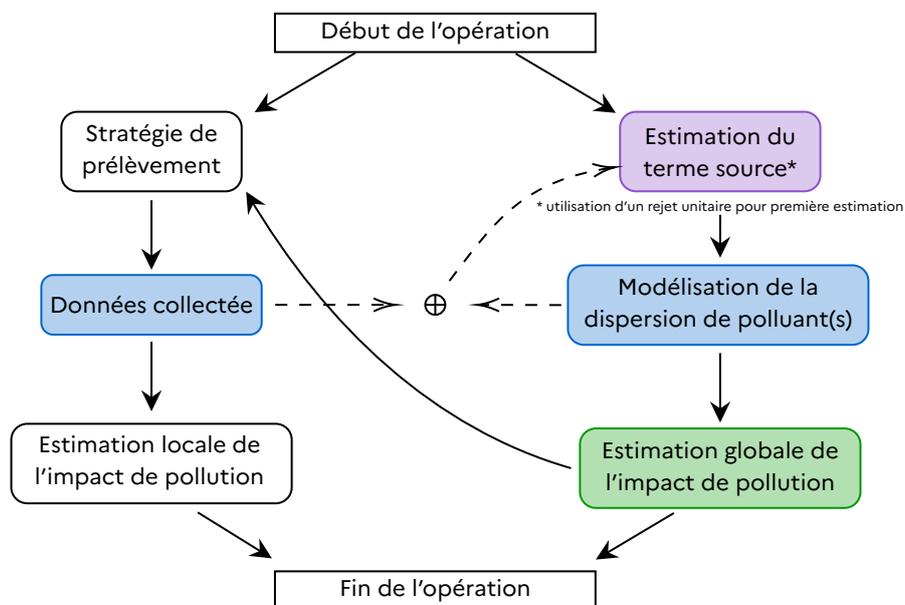


Figure 2 – Ressources du LCPP pour évaluer les risques des fumées d’incendies de grande ampleur pour la santé et l’environnement

modèle de dispersion atmosphérique associé à une approche par assimilation de données permet d’obtenir une estimation plus fine des niveaux de concentration sur des points d’intérêts.

Un certain nombre de travaux de recherche ont été réalisés dans le champ des mathématiques appliquées pour coupler les résultats de simulations numériques avec des mesures de terrain. Des approches d’assimilation de données ont été développées et validées dans le contexte de la pollution chronique en milieu urbain afin d’améliorer les résultats de simulations en utilisant des mesures de concentration en quelques points d’observation (p. ex. Soulhac et al., 2016; Tilloy et al., 2013). Les mesures de terrain peuvent également être utilisées pour déterminer par modélisation inverse les caractéristiques d’une source de polluant (localisation, débit d’émission), notamment dans un contexte accidentel NRBC ou terroriste (Barlow and Coceal, 2009; Belcher et al., 2014; Britter and Hanna, 2003).

L’objectif de cette thèse est d’explorer comment les méthodes de modélisation inverse peuvent être mises en œuvre et développées pour caractériser les rejets de fumée des incendies de grande ampleur en milieu urbain. Ces travaux sont basés sur le développement et la validation d’un système de modélisation inverse par assimilation de données applicable de manière opérationnelle. Un tel système vise à caractériser la source de fumée à partir de mesures sur le terrain et à simuler la dispersion du panache dans l’atmosphère. En situation de rejet accidentel, l’émission est *a priori* inconnue et les simulations pour analyser le comportement du panache de fumée sont alors réalisées avec des hypothèses et des incertitudes importantes. Lorsque nous disposons de données sur les concentrations de substances issues des fumées, il devient intéressant d’utiliser une méthode de modélisation inverse qui combine ces mesures avec un modèle de dispersion pour déterminer le rejet polluant (débit émis, dynamique temporelle). Cette approche a été peu appliquée à la dispersion d’un panache de fumée en situation de rejet flottant, pour lequel la hauteur d’émission est une donnée importante à caractériser.

L’outil de modélisation considéré pour la réalisation de ces travaux est un modèle lagrangien. De part sa structure de représentation multi-échelle, il doit permettre de combiner na-

turellement l'assimilation d'observations à proximité de l'incendie et plus lointaines pour des contraintes de temps relativement faibles. Le type de modèle lagrangien utilisé dans ces travaux permet de modéliser uniquement la trajectoire des polluants sur un domaine méso-échelle, limitant le temps de calcul et la diffusion numérique, et est ainsi donc souvent utilisé dans un cadre opérationnel (Armand et al., 2021).

Un état de l'art est dans un premier temps mené dans le chapitre 1 sur l'estimation du terme source à partir de l'évolution de la puissance de l'incendie et de la cinétique de développement du feu afin de déterminer les caractéristiques thermocinétiques d'un rejet d'incendie. L'objectif est d'identifier les paramètres de la source polluante les plus pertinents à prendre en compte dans le cadre de la modélisation inverse. De plus, une étude des corrélations incendie-fumées permet, lorsque des informations sur la composition des fumées sont disponibles, la production d'un terme d'ébauche et peut être mis à profit dans l'application de la méthodologie d'inversion.

Une étude bibliographique est menée dans le chapitre 2 sur les principes généraux de la phénoménologie de l'écoulement atmosphérique et de l'approche de modélisation lagrangienne utilisée dans ces travaux. L'objectif de cet état de l'art est d'identifier tous les paramètres nécessaires à la modélisation de l'écoulement et de la dispersion.

Enfin, un état de l'art est réalisé dans le chapitre 3 sur les divers aspects méthodologiques de l'inversion (e.g. positivité du terme source, (Dumont Le Brazidec et al., 2021; Winiarek et al., 2014)). Une méthode semi-bayésienne et une méthode bayésienne de type Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) y sont décrites et implémentées pour la caractérisation de la source. Du point de vue de la méthodologie de modélisation inverse, un des enjeux est de développer une approche compatible avec les moyens de mesures sur le terrain et la stratégie de prélèvement à mettre en œuvre.

L'outil de modélisation est testé et validé par comparaison avec des données synthétiques dans le chapitre 3, et testé avec des données de terrain obtenues suite à un incendie réel en collaboration avec les services de secours et le réseau de surveillance de la qualité de l'air de la région Île-de-France dans le chapitre 4. Ces travaux sont menés en gardant à l'esprit le contexte et les contraintes opérationnelles inhérentes à la gestion d'un événement de grande ampleur, notamment en limitant le temps de simulation du système inverse. De plus, certaines informations, telles que la pollution déjà présente avant l'incendie, peuvent être difficiles à estimer, *a fortiori* en situation opérationnelle. Des ajustements de la méthodologie inverse sont par conséquent développés dans le chapitre 4 pour retrouver ce type d'information destinés à améliorer la robustesse des résultats.

# Chapitre 1

## Caractérisation d'un terme source pour l'incendie

La modélisation de l'écoulement et de la dispersion atmosphérique, décrite dans le chapitre suivant, est utilisée pour estimer la pollution résultante des fumées d'incendies de grande ampleur. Pour mettre en œuvre la modélisation de la dispersion des fumées, il est nécessaire de paramétrer les données d'entrée relatives aux rejets des polluants considérés. La caractérisation du rejet est déterminée par les caractéristiques thermocinétiques de l'incendie, l'influence de la ventilation sur l'incendie, la composition en polluants des fumées (Steinhaus et al., 2007) et l'influence de l'extinction par l'action des pompiers (Hua et al., 2002 ; Janardhan et al., 2022).

Une des substances polluantes communément retrouvée dans les incendies est décrite dans ces travaux pour constituer le polluant cible. Le débit de rejet associé aux polluants est défini dans ce chapitre et une étude des corrélations entre le feu et les fumées d'incendie (Heskestad G., 1983, 1984, 1986 ; National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016), utilisées en particulier dans les analyses de risques (Groupe de Travail Dépôt de Liquides Inflammables, 2006 ; Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques, 2005 ; Robert and Casella, 1999 ; Vigne et al., 2018), est réalisée pour déterminer les caractéristiques du rejet de fumée. Ces corrélations dépendent de la puissance dégagée par l'incendie et permettent d'estimer la hauteur d'émission de la source, le débit des fumées, ainsi que la température et la vitesse d'éjection. Outre la hauteur d'émission de la source, il existe un phénomène appelé "élévation du panache" ou "surhauteur" du panache de fumée (Briggs, 1982) qu'il est également possible de modéliser en fonction de la puissance de l'incendie.

Ce chapitre présente le processus de détermination d'une paramétrisation descriptive des émissions de fumée implémenté dans le cadre de la modélisation de la dispersion atmosphérique. Pour ce faire, la caractérisation d'un incendie est définie dans la section 1.1, suivie de la caractérisation du polluant cible et des fumées d'incendie sur la base du document (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016) dans la section 1.2. Le phénomène de surhauteur est ensuite détaillé dans la section 1.3. Enfin, la section 1.4 présente la mise en œuvre des corrélations dans le cadre de l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame de Paris en 2019. Cette application est basée sur des travaux effectués par l'INERIS (2019) pour analyser le phénomène d'élévation du panache.

## 1.1 Caractérisation des incendies

Dans ces travaux, nous nous intéressons aux incendies de grande ampleur en milieu urbain avec la présence d'un front de flamme quasi-stationnaire *a contrario* d'un front mobile séparant la zone brûlée de la végétation non brûlée pour les feux de forêt (Costes et al., 2021; Xu et al., 2022; Yao et al., 2013). Outre le dimensionnement spatial, un incendie peut être décrit par trois phases temporelles : une phase de développement, une phase pleinement développée et une phase de décroissance de l'incendie (Blagojevic and Pesic, 2011).

Dans cette section, nous caractérisons un incendie par l'intermédiaire de sa puissance thermique. Cette dernière, corrélée à la hauteur de flamme, est utilisée pour la modélisation des incendies et du rejet lié au panache de fumée.

### 1.1.1 Description par la puissance

Le dégagement total de chaleur d'un incendie est la quantité totale d'énergie thermique libérée par la combustion des matériaux en feu. Cette mesure, qui correspond à la puissance d'un incendie ou *heat release rate (HRR)*, inclut tous les flux d'énergie thermique résultant des processus de combustion chimique et de la propagation des flammes (Candel et al., 2009; Dowling and Mahmoudi, 2015). La puissance thermique est la caractéristique principale d'un incendie (Babrauskas and Peacock, 1992). Plus la puissance est élevée, plus la combustion peut s'intensifier et entraîner une production accrue de fumée et de produits de décomposition.

La puissance thermique totale d'un incendie notée  $Q_t$  peut être déterminée à l'aide de la relation (1.1) (Steinhaus et al., 2007).

$$Q_t = m'' \times \Delta C \times S_{\text{feu}} \times \eta \quad \text{ou} \quad Q_t = HRRPUA \times S_{\text{feu}} \times \eta \quad (1.1)$$

Cette puissance est exprimée en kW et dépend de la vitesse spécifique de combustion  $m''$  exprimée en  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ , de la chaleur de combustion  $\Delta C$  exprimée en  $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$  ou de la puissance par unité de surface  $HRRPUA = m'' \times \Delta C$ , de la surface du combustible en feu  $S_{\text{feu}}$  exprimée en  $\text{m}^2$  et du rendement de la combustion  $\eta$  correspondant à une valeur sans dimension comprise entre 0 et 1. Le rendement de combustion est en général estimé à 1.

Il existe deux modes physiques fondamentaux de transfert d'énergie : la conduction et la radiation. Dans la conduction, l'énergie se diffuse lentement à travers un milieu, d'un point de température élevée à un point de température plus basse, tandis que dans la radiation, l'énergie est transmise à la vitesse de la lumière par des ondes électromagnétiques (ou photons) et un milieu de transmission n'est pas nécessaire (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). Le transfert de chaleur entre un solide et un fluide en mouvement est appelé convection. D'un point de vue conceptuel, la convection n'est donc pas un mode fondamental de transfert de chaleur. Elle se produit plutôt par un effet combiné de la conduction (et/ou du rayonnement) et du mouvement du milieu de transmission. Néanmoins, la convection joue un rôle très important dans les incendies. Elle transporte l'énorme quantité d'énergie chimique libérée lors d'un incendie vers le milieu environnant par le mouvement des gaz chauds.

La puissance convectée  $Q_c$  est exprimée à partir de la puissance thermique totale de l'incendie et d'un coefficient fixe  $\alpha_c$  représentant la fraction de la puissance thermique totale transférée par convection.

$$Q_c = \alpha_c \times Q_t \quad (1.2)$$

La valeur de  $\alpha_c$  est en général définie à 2/3. La puissance  $Q_c$  est utilisée pour définir les caractéristiques liées aux fumées d'incendie décrites dans la section 1.2.

La puissance d'un incendie peut être déterminée à partir de moyens de mesures, tels que les calorimètres qui reposent sur le principe de la consommation d'oxygène (Huggett, 1980) pour des expériences contrôlées, ou à partir de la détermination des éléments qui la composent :  $\Delta C$ ,  $m''$  et  $S_{\text{feu}}$ . Des valeurs de chaleur de combustion  $\Delta C$  peuvent être calculées à partir de la composition élémentaire du combustible identifié (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016) ou sur la base d'expériences (FLUMilog, 2011; National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). La vitesse spécifique de combustion  $m''$  peut également être déterminée à partir d'expériences (FLUMilog, 2011; National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016) ou au moyen de formules exprimées en fonction de valeurs observables (Chatris et al., 2001; Guo et al., 2023; MUNOZ et al., 2004). Il convient de noter que les vitesses spécifiques de combustion sont soit obtenues pour un état compact ou divisé du matériau considéré, par exemple  $17 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$  pour le bois sous forme compacte et  $60 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$  sous forme divisée pour une palette. En effet, des expérimentations ont révélé que la puissance maximale était fortement dépendante de la compacité du produit et plus particulièrement, de la surface de contact air/matériau (FLUMilog, 2011).

Dès lors que des valeurs de  $\Delta C$  et  $m''$  sont disponibles, il est possible d'identifier la puissance surfacique de l'incendie  $HRRPUA$ . Enfin, cette valeur  $HRRPUA$  associée à l'estimation de la surface en feu  $S_{\text{feu}}$  permet d'obtenir une puissance totale thermique dégagée par l'incendie.

## 1.1.2 Corrélation liée à la hauteur de flamme

La surface en feu et la hauteur de flamme peuvent être estimées visuellement et exploitées pour définir  $m''$  au moyen de corrélations (par exemple dans Cox and Chitty, 1985; McCaffrey, 1983; National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016; Raj, 2007; Thomas, 1963; Zukoski, 1986).

La corrélation la plus connue et la plus largement adoptée pour calculer le rapport entre la hauteur de la flamme  $L$  et un diamètre équivalent  $D_{\text{feu}}$  d'une source de surface  $S_{\text{feu}}$  est celle de Thomas (1963) (Bubbico et al., 2016). Le diamètre équivalent est calculé par la relation  $D_{\text{feu}} = (4 S_{\text{feu}}/\pi)^{1/2}$  lorsque la source n'est pas circulaire. La relation est définie par (1.3) et déterminée lors d'une expérience utilisant des morceaux de bois dans des conditions de vent nul, avec  $\rho_\infty$  correspondant à la masse volumique de l'air à la température ambiante et  $g$  la constante d'accélération gravitationnelle.

$$\frac{L}{D_{\text{feu}}} = 42 \left( \frac{m''}{\rho_\infty \sqrt{g D_{\text{feu}}}} \right)^{0,61} \quad (1.3)$$

Selon Thomas (1963), pour une zone d'incendie très étendue et des vitesses de combustion  $m''$  de l'ordre de celles que l'on trouve pour un incendie de grande ampleur (FLUMilog, 2011), le rapport  $L/D_{\text{feu}}$  peut être très faible et l'on peut s'attendre à ce que la turbulence brise l'enveloppe de la flamme. Par conséquent, un incendie de grande ampleur ne peut pas être considéré comme ayant une enveloppe continue délimitée par la zone d'incendie, mais tendrait à devenir un ensemble de feux dont la surface et le nombre peuvent varier.

La plupart des corrélations liées à la hauteur de flamme sont établies pour des diamètres d'incendies restreints, de l'ordre de la dizaine ou de la vingtaine de mètres. En condition acci-

dentelle, les diamètres de feu considérés peuvent être significativement plus importants (supérieurs à 20 m) et il existe en définitive peu de données relatives à des incendies de grande échelle.

### 1.1.3 Modélisation d'incendies

Une étude menée en 2003 (Olenick, 2003) décrit une douzaine de modèles de mécanique de fluides numériques (CFD) spécifiquement conçus pour la modélisation d'incendies.

Nombre de ces modèles représentent les processus physiques complexes impliqués dans un incendie, tels que la combustion, la propagation de la chaleur, la production et la dispersion de la fumée, et les interactions entre le feu, les surfaces et l'air (par exemple dans COX and KUMAR, 1987; Matheislova et al., 2010; McGrattan and Forney, 2000). Ces modèles offrent ainsi des simulations détaillées sur la manière dont un incendie pourrait se développer dans un espace donné. Les applications courantes comprennent l'évaluation de la sécurité incendie dans des bâtiments, la conception de systèmes de protection incendie, l'analyse des évacuations en cas d'urgence et l'examen des impacts de la fumée et de la chaleur sur les personnes et les structures. Leur capacité à fournir des informations précieuses sur le comportement du feu en ont fait des outils indispensables pour les ingénieurs en sécurité incendie, les chercheurs et les concepteurs de structures (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). Cependant, ils n'ont pas encore atteint le point de simuler de manière fiable, pour des applications à grande échelle, des phénomènes aussi importants que la propagation, l'extinction et la suppression des flammes, ainsi que la production de CO et de fumée, qui requièrent une chimie et une physique plus détaillées que celles qui sont actuellement incorporées dans les modèles.

Compte tenu des incertitudes liées aux données d'entrée des modèles d'incendie, la complexité de mise en œuvre et les dimensions des domaines de calcul traités dans le cadre des incendies de grande ampleur, nous nous intéressons à la caractérisation du rejet de fumée via l'utilisation de corrélations empiriques.

## 1.2 Caractérisation des fumées d'incendies

L'émission associée aux polluants générés dans les fumées d'incendies est caractérisée dans la section qui suit. Le débit d'émission  $d_p$  d'un polluant  $y$  est défini ainsi que la substance cible. Dans un second temps, les caractéristiques associées aux fumées d'incendies sont définies. La hauteur d'émission des fumées au-dessus de la flamme  $z_s$  ainsi que le débit des fumées  $d_f$  utilisé pour définir la température moyenne des fumées  $T_f$  et la vitesse d'éjection moyenne des fumées  $v_f$  sont établis. Le panache de fumée est soumis à un effet d'ascension dû à l'effet de flottabilité thermique induit par l'augmentation de la température moyenne des fumées  $T_f$  par rapport à la température ambiante et à l'effet de jet induit par la vitesse d'éjection moyenne des fumées  $v_f$ . Ces deux effets peuvent être modélisés à travers des modèles dits de "surhauteur" (ou *plume rise*). La hauteur  $z_s$  associée à la surhauteur forme la hauteur effective atteinte par le panache. Le phénomène d'élévation du panache sera étudié dans la section 1.3.

## 1.2.1 Substances polluantes

### Estimation du débit

L'objectif est d'obtenir les débits  $d_p$  associés aux substances polluantes émises. Le débit d'un polluant  $d_p$  est défini par la relation (1.4) en fonction de la vitesse spécifique de combustion  $m''$ , de la surface en feu  $S_{\text{feu}}$  et d'un taux de production du polluant  $\tau_{\text{polluant}}$ .

$$d_p = m'' \tau_{\text{polluant}} S_{\text{feu}} \quad (1.4)$$

Le taux de production, la vitesse spécifique et la chaleur de combustion dépendent du combustible et des conditions de combustion (taille du foyer, ventilation). Le taux de production  $\tau_{\text{polluant}}$ , communément obtenu expérimentalement à petite échelle, est la donnée qui comporte les incertitudes les plus importantes. Ce taux de production sera l'objet d'une estimation dans le chapitre 4.

### Particules de suie

Des particules fines, des cendres, des composés organiques volatils, des particules de charbon, etc. peuvent composer les émissions lors d'incendies. Dans ces travaux, l'intérêt est porté sur les émissions courantes associées à la combustion d'un incendie : les suies qui correspondent aux particules solides de carbone présentes dans la fumée (Glassman, 1989; Kent and Wagner, 1984).

La suie se forme dans les régions de la flamme riches en combustible et augmente en taille par le biais de réactions gaz-solide, suivies d'une oxydation (combustion) pour produire des produits gazeux tels que CO et le CO<sub>2</sub> (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). La petite taille des particules de suie et leur capacité à rester en suspension dans l'air peuvent avoir des conséquences majeures sur la qualité de l'air, la santé et le climat (Chakrabarty et al., 2014; Niranjana and Thakur, 2017). Pour définir l'espèce particulière à considérer dans ces travaux, nous nous basons sur la capacité des appareils de mesure des particules. La substance polluante ainsi considérée concerne les PM<sub>10</sub> : particules dont le diamètre aérodynamique est inférieur à 10 µm. Pour un incendie, les PM<sub>10</sub> sont composées majoritairement de PM<sub>1</sub> (Ouf et al., 2019). Ces dernières sont les plus nocives en raison de leur faible diamètre qui les empêche d'être filtrées par les voies respiratoires et favorise leur infiltration dans la circulation sanguine, ce qui peut entraîner de graves problèmes de santé (Lipsett et al., 1994).

Les distributions de taille des particules de suie sont obtenues à l'aide de divers instruments de mesure conçus à l'origine pour analyser des particules sphériques (Lintis, 2018). Afin d'interpréter ces données avec précision et de déterminer les caractéristiques morphologiques des particules de suie, il est nécessaire d'appliquer des calculs de conversion spécifiques. De nombreux diamètres équivalents et facteurs de forme ont été développés pour décrire la géométrie parfois complexe des aérosols. En particulier, DeCarlo et al. (2004) ont développé des relations pour calculer les densités et les dimensions des particules de suie en tenant compte de leur structure fractale.

Dans le domaine des aérosols, des diamètres équivalents sont utilisés pour décrire le comportement physique des particules irrégulières se déplaçant dans le gaz environnant. La géométrie d'une particule irrégulière peut être approchée par un diamètre  $d_i$  coïncidant avec la particule non sphérique par l'application d'un facteur de forme géométrique  $\chi$ . Ce dernier

caractérise la manière dont une particule irrégulière occupe l'espace tridimensionnel, englobant des aspects tels que sa taille, sa forme, ses dimensions et son orientation. Il existe au moins deux types de diamètres permettant de décrire une particule irrégulière : le diamètre de Stokes  $d_s$  avec une vitesse de chute libre suivant la loi de Stokes pour une densité de particule  $\rho_p$  et le diamètre aérodynamique  $d_a$  pour lequel la densité de la particule  $\rho_a$  est de  $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ . Le diamètre aérodynamique  $d_a$  peut être exprimé en fonction du diamètre de Stokes (1.5a) et en fonction du diamètre  $d_i$  (1.5b), où  $\rho_\infty$  représente la densité de l'air.

$$d_a = d_s \left( \frac{\rho_p - \rho_\infty}{\rho_a - \rho_\infty} \right)^{1/2}, \quad \rho_a = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (1.5a)$$

$$d_a = d_i \left( \frac{\rho_p - \rho_\infty}{(\rho_a - \rho_\infty)\chi} \right)^{1/2}, \quad \rho_a = 1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \quad (1.5b)$$

Le lien entre le diamètre représentatif de la particule irrégulière et le diamètre de Stokes est  $d_s = d_i \chi^{-1/2}$ . Ces différents diamètres sont explicités dans la figure 1.1.

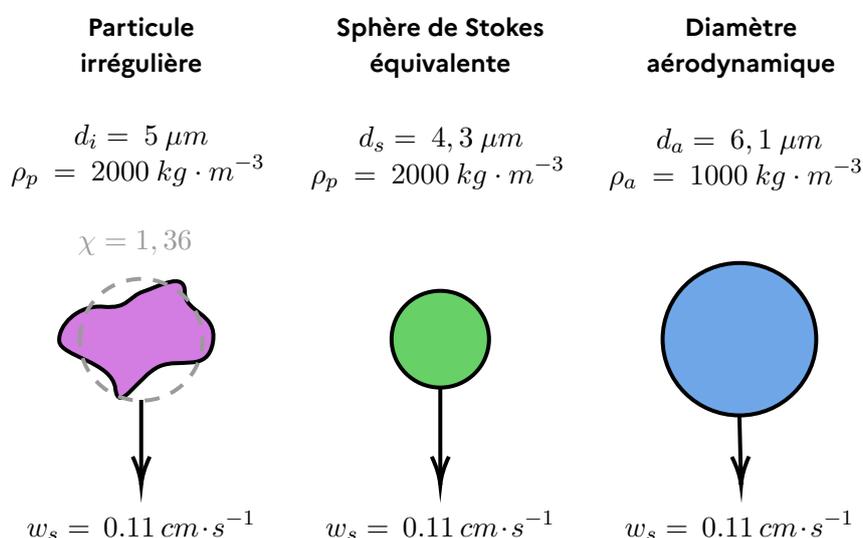


Figure 1.1 – Lien entre particule irrégulière, diamètre de Stokes et diamètre aérodynamique.  $d_i$  est le diamètre de la particule associée à la forme irrégulière,  $d_s$  est le diamètre de Stokes équivalent et  $d_a$  est le diamètre aérodynamique équivalent.  $\rho_p$  est la densité de la particule,  $\rho_a$  est la densité de la particule définie pour un diamètre aérodynamique et  $\rho_\infty$  est la densité de l'air.  $w_s$  est le résultat de la vitesse de sédimentation calculée à l'aide de la formule de Stokes (2.14). Le facteur de forme  $\chi = 1,36$  est tiré de (DeCarlo et al., 2004) descriptif du quartz.

Les diamètres sont ainsi définis pour une même vitesse de sédimentation  $w_s$ .

## 1.2.2 Caractéristiques des fumées

Dans ces travaux, la caractérisation des fumées et de l'émission est basée sur les formules proposées par Heskestad (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016) à partir de la puissance de l'incendie.

### 1.2.2.1 Formulations générales

À une altitude donnée dans le panache, le rayon  $b_{\Delta T}$  du panache est défini au point où l'augmentation de température a diminué à  $0,5 \Delta T_{ax}$  (relation (1.6a)),  $\Delta T_{ax}$  correspond à l'aug-

mentation de la température sur l'axe central du panache (relation (1.6b)) et  $v_{ax}$  est la vitesse d'éjection sur l'axe central du panache (relation (1.6c)). Leur définition est illustrée dans la figure 1.2. Ces formulations sont utilisées pour déterminer les paramètres :  $z_s$  pour l'émission

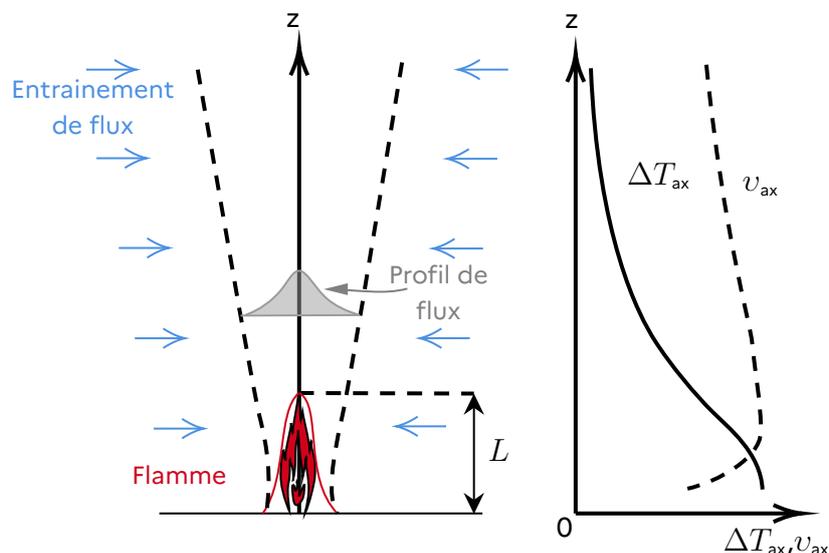


Figure 1.2 – Caractéristiques d'un panache d'incendie, notamment les variations verticales d'augmentation de la température  $\Delta T_{ax}$  sur l'axe central du panache et de la vitesse  $v_{ax}$  des fumées.  $L$  définit la hauteur de la flamme. Basé sur Heskestad G. (1984).

au-dessus des flammes,  $T_f$  pour la température moyenne des fumées et  $v_f$  pour la vitesse d'éjection moyenne des fumées. L'objectif de ces deux derniers paramètres est de déterminer la hauteur d'élévation du panache (détaillée en section 1.3). Il s'agit des données d'entrée pour la modélisation de la dispersion atmosphérique,

$$b_{\Delta T} = 0,12 \left( \frac{T_{ax}}{T_{\infty}} \right)^{1/2} (z - z_v) \quad (1.6a)$$

$$\Delta T_{ax} = 9,1 \left( \frac{T_{\infty}}{g C_{\infty}^2 \rho_{\infty}^2} \right)^{1/3} Q_c^{2/3} (z - z_v)^{-5/3} \quad (1.6b)$$

$$v_{ax} = 3,4 \left( \frac{g}{C_{\infty} \rho_{\infty} T_{\infty}} \right)^{1/3} Q_c^{1/3} (z - z_v)^{-1/3} \quad (1.6c)$$

où

- $z$  est l'altitude courante (en m)
- $T_{ax}$  est la température des fumées sur l'axe central du panache (en K)
- $z_v$  est l'altitude virtuelle (en m)
- $\rho_{\infty}$  est la densité de l'air ambiant (en  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
- $T_{\infty}$  est la température ambiante (en K)
- $C_{\infty}$  représente la capacité calorifique massique de l'air à pression constante (en  $\text{kJ}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$ )
- $g$  est la constante d'accélération gravitationnelle (en  $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ )
- $Q_c$  est la puissance convective introduite précédemment (en kW)

Outre ces formulations, le débit des fumées  $d_f$ , exprimé en  $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ , incluant une grande majorité d'entraînement d'air est défini par la relation (1.7) ((Heskestad G., 1986)).

$$d_f = 0,196 \left( \frac{g\rho_\infty^2}{C_\infty T_\infty} \right)^{1/3} Q_c^{1/3} (z - z_v)^{5/3} \times \left[ 1 + \frac{2,9 Q_c^{2/3}}{(g^{1/2} C_\infty \rho_\infty T_\infty)^{2/3} (z - z_v)^{5/3}} \right] \quad (1.7)$$

Cette formulation est définie à la hauteur moyenne de la flamme et au-dessus de celle-ci (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016) et permet de calculer la température moyenne et la vitesse d'éjection moyenne des fumées.

Sur la base d'une étude de sensibilité disponible en annexe A.1, les formules sont explicitées avec une valeur de température ambiante fixée à  $T_\infty = 293 \text{ K}$  avec  $\rho_\infty = 1,2 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  la masse volumique de l'air sec à  $T_\infty = 293 \text{ K}$  et à pression atmosphérique  $1013,25 \text{ hPa}$ . Les corrélations (1.6a), (1.6b) et (1.6c) sont également établies en fonction des constantes physiques  $C_\infty = 1,005 \text{ kJ}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}$  qui représente la capacité calorifique massique de l'air à pression constante et  $g = 9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  la constante d'accélération gravitationnelle. Les formulations générales évoquées dans cette section sont ainsi simplifiées et exprimées dans la suite de cette section.

### 1.2.2.2 Simplification des formulations

La détermination de  $z_s$ ,  $T_f$ ,  $v_f$  et  $d_f$  à partir des formules (1.6b), (1.6a), (1.6c) et (1.7) est effectuée ci-après.

#### — Hauteur d'émission :

La hauteur d'émission  $z_s$  est la hauteur pour laquelle les fumées sont émises au-dessus des flammes. Elle est définie lorsque l'augmentation de la température entre l'air ambiant et la ligne centrale du panache de fumée  $\Delta T_{ax}$  est considérée égale à  $500 \text{ K}$  dans le document (INERIS, 2023).

Cette hauteur  $z_s$  est obtenue à partir de l'équation (1.6b) qui permet de déterminer l'augmentation de température  $\Delta T_{ax}$  atteinte sur la ligne médiane du panache. Pour obtenir  $z_s$ , la relation (1.6b) est réécrite par (1.8) :

$$z = \left( \frac{\Delta T_{ax}}{9,1} \right)^{-3/5} \left( \frac{T_\infty}{g C_\infty^2 \rho_\infty^2} \right)^{1/5} Q_c^{2/5} + z_v \quad (1.8)$$

Compte tenu des constantes physiques introduites précédemment, l'équation (1.8) se simplifie en l'équation (1.9) en fonction de  $\Delta T_{ax}$ , de la puissance convective  $Q_c$  et d'une hauteur virtuelle  $z_v$  correspondant à la position du point d'origine du cône enveloppant le panache (cf figure 1.2).

$$z = 6,9 \Delta T_{ax}^{-3/5} Q_c^{2/5} + z_v \quad (1.9)$$

Lorsque  $\Delta T_{ax} = 500 \text{ K}$ , la hauteur d'émission  $z_s$  est obtenue par la relation (1.10).

$$z_s = 0,166 Q_c^{2/5} + z_v \quad (1.10)$$

Plusieurs formules existent pour déterminer la valeur de  $z_0$ , notamment en fonction de la hauteur de la flamme observée  $L$ ; par exemple  $z_v = L - 0,175 Q_c^{2/5}$  (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). Il est à noter que pour les incendies d'une grande quantité de matériaux stockés verticalement, de type rack, la valeur de  $z_v$  est fixée à  $0$  (Heskestad G., 1983, 1984; INERIS, 2023).

— **Débit des fumées :**

Le débit des fumées avec entraînement d'air, pour  $z \geq z_s$ , permet de déterminer la vitesse d'éjection moyenne des fumées et la température moyenne des fumées.

En utilisant les constantes physiques introduites, la formulation du débit total des fumées (avec entraînement d'air) (1.7) est simplifiée en (1.11).

$$d_f = 0,071 Q_c^{1/3} (z - z_v)^{5/3} \times [1 + 0,027 Q_c^{2/3} (z - z_v)^{-5/3}] \quad (1.11)$$

— **Température des fumées :**

La température moyenne est une donnée d'entrée pour définir la flottabilité dans les modèles de surhauteur.

$\Delta T_{ax}$  étant défini comme l'augmentation de la température par rapport à l'air ambiant sur l'axe central du panache, la température des fumées sur l'axe central du panache est définie par la relation (1.12), avec  $T_\infty$  représentant la température ambiante.

$$T_{ax} = \Delta T_{ax} + T_\infty \quad (1.12)$$

Dans le panache, un profil radial gaussien est pris en compte pour caractériser l'augmentation de la température par rapport à la température ambiante (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016). La figure 1.3 schématise le profil gaussien  $f_{\Delta T}(r)$  associé à la température pour une altitude fixée. La relation (1.6a)

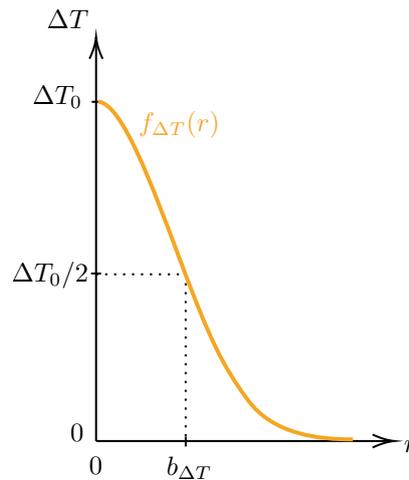


Figure 1.3 – Profil gaussien  $f_{\Delta T}(r)$  de l'augmentation de la température en fonction du rayon  $r$  associé à la température des fumées à une altitude fixée.

définit le rayon de température  $b_{\Delta T}$  représenté sur la figure 1.3 lorsque l'augmentation de la température a décliné jusqu'à  $\Delta T_{ax}/2$ .

La température moyenne des fumées  $T_f$  est définie par (1.13) en fonction de la puissance convective  $Q_c$ , de la chaleur spécifique de l'air  $C_\infty$  calculée à température ambiante  $T_\infty$  et du débit des fumées  $d_f$  (INERIS, 2023).

$$T_f = T_\infty + \frac{Q_c}{d_f C_\infty} \quad (1.13)$$

— **Vitesse d'éjection :** Comme la température moyenne des fumées, la vitesse d'éjection moyenne est une donnée d'entrée pour définir la flottabilité dans modèles de surhauteur.

En utilisant la relation (1.8) et les constantes physiques introduites, la vitesse d'éjection sur l'axe du panache  $v_{ax}$  est déterminée comme suit :

$$\begin{aligned} v_{ax} &= 3,4 \left( \frac{g}{C_{\infty} \rho_{\infty} T_{\infty}} \right)^{1/3} Q_c^{1/3} (z - z_v)^{-1/3} \\ &= 1,03 Q_c^{1/3} (z - z_v)^{-1/3} \end{aligned}$$

De la même manière que pour la température des fumées, un profil gaussien radial est considéré pour caractériser la vitesse d'éjection (également appelée vitesse d'ascension) des fumées (National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016).

La vitesse d'éjection moyenne des fumées s'exprime en fonction du débit des fumées, du rayon  $b_{\Delta T}$  (1.6a) et de la masse volumique calculée à la température moyenne des fumées  $\rho_{T_f}$  par la relation (1.14) (INERIS, 2023).

$$v_f = \frac{d_f}{2 \rho_{T_f} \times \pi b_{\Delta T}^2} \quad (1.14)$$

La hauteur d'émission  $z_s$  (relation (1.10)) et le débit  $d_p$  (relation (1.4)) constituent les caractéristiques de l'émission. La température et la vitesse d'éjection des fumées constituent les caractéristiques des fumées et peuvent être utilisées pour définir la flottabilité induisant le phénomène de surhauteur. La hauteur  $z_s$  s'accompagne d'un phénomène de surhauteur estimé notamment à travers les paramètres de température des fumées et de vitesse d'éjection des fumées. La description de ce phénomène est l'objet de la section suivante.

### 1.3 Phénomène de surhauteur

Dans le cas de rejets de température beaucoup plus élevée que celle de l'air ambiant ou de rejets émis avec une vitesse d'éjection importante, le panache atteint une certaine hauteur avant de suivre un comportement identique à celui de l'air ambiant (Marro et al., 2013; Marshall, 1986) et de satisfaire les équations qui caractérisent l'évolution d'un polluant dans l'air. Ce phénomène, connu sous le nom de "surhauteur", se produit dans les champs proches de la source dans ce que l'on appelle la phase transitoire d'élévation, laquelle dépend principalement des conditions de rejet. La figure 1.4 résume le comportement du panache à proximité de la source. La hauteur finale atteinte par le panache est appelée "hauteur effective" dans la suite de ces travaux.

Les modèles d'élévation du panache entrent en jeu lors de l'étude de la dispersion atmosphérique, soit en complément, soit en conjonction avec l'utilisation de modèles de dispersion. La première façon d'évaluer la surhauteur consiste à précalculer la hauteur effective, à l'aide d'un modèle de surhauteur simplifié puis d'utiliser cette hauteur effective comme donnée d'entrée du modèle de dispersion. Une seconde méthode consiste à utiliser un modèle d'élévation du panache intégré à un modèle de dispersion. Ce type de modèle permet le diagnostic de la trajectoire du panache à chaque itération numérique. Les caractéristiques de l'écoulement atmosphérique sont mises à jour et la résolution des équations d'advection-diffusion effectuée à chaque itération, ce qui est plus coûteux en termes de temps de calcul.

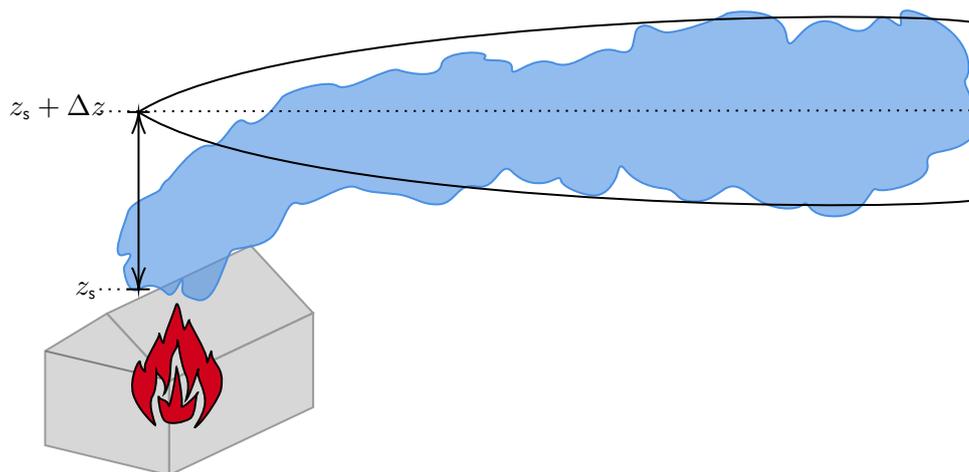


Figure 1.4 – Dispersion d’un panache à proximité de la source. Le phénomène est décomposé en une phase transitoire d’élévation (hachurée) et une phase de dispersion.  $\Delta z$  est la surhauteur par rapport à  $z_s$  la hauteur d’émission.

### 1.3.1 Surhauteur et couche d’inversion

L’estimation de la hauteur effective du panache peut induire une sur- ou une sous-estimation de la concentration des polluants au sol, en particulier en cas de forte stratification de la couche limite atmosphérique et en présence d’une couche d’inversion<sup>1</sup>.

Dans le cas d’une élévation importante du panache de fumée, celui-ci peut pénétrer, totalement ou partiellement, dans une couche d’inversion (Hanna and Paine, 1989 ; Korsakissok and Mallet, 2009). Une façon de modéliser ce phénomène consiste à supposer deux panaches : l’un modélisé au-dessus de la hauteur d’inversion qui symbolise la frontière et l’autre modélisé en dessous. La figure 1.5 illustre ce phénomène avec deux calculs de surhauteur  $\Delta z$  et  $\Delta z'$  en fonction de la hauteur d’inversion.

Si, par simplification, l’ensemble du panache est modélisé en dessous d’une couche d’inversion, les concentrations seront surestimées. *A contrario*, si l’ensemble du panache est modélisé au-dessus d’une couche d’inversion, la concentration au sol sera estimée nulle. Ainsi, sans prise en compte de cette pénétration, l’estimation des concentrations par le modèle peut être fortement biaisée (Hanna and Paine, 1989).

### 1.3.2 Modèles de surhauteur

Les modèles de surhauteur sont utilisés pour déterminer la différence ( $\Delta z$ ) entre la hauteur d’éjection ( $z_s$ ) et la hauteur finale ( $z_f$ ) atteinte par le panache. La relation (1.15) caractérise cette surhauteur.

$$z_f = z_s + \Delta z \quad (1.15)$$

Les effets thermodynamiques liées à la surhauteur sont à la fois thermiques, par un effet de flottabilité  $F_b$ , et mécaniques, par un effet de jet  $F_m$ . Dans ces travaux, l’effet thermique induit d’un incendie est dominant par rapport à l’effet mécanique. Ce dernier sera par conséquent négligé. Une manière de définir  $F_b$  consiste à considérer les effets thermiques dus à la différence de température entre le rejet et l’air ambiant. L’expression de ce terme est alors basée sur les caractéristiques de la source (diamètre  $D_{feu}$ , hauteur  $z_s$ ), les caractéristiques de

1. Les phénomènes associés à la couche limite et la couche d’inversion sont détaillés dans la section 2.1.2.

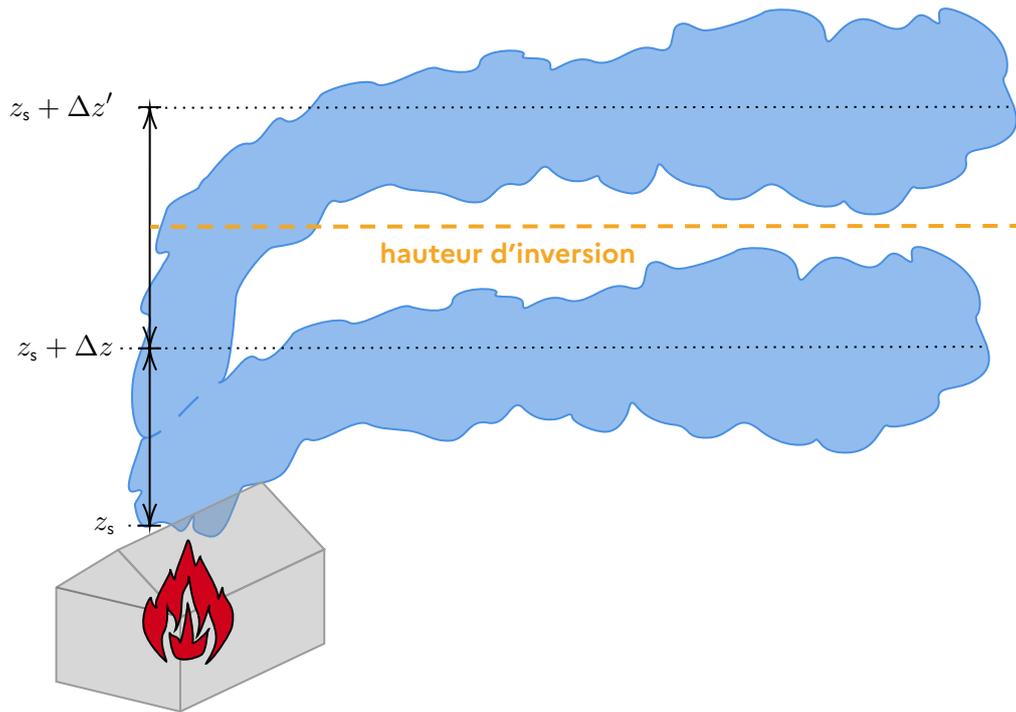


Figure 1.5 – Configuration de pénétration partielle dans une couche d'inversion avec deux surhauteurs  $\Delta z$  et  $\Delta z'$ ;  $z_s$  la hauteur d'émission.

l'air ambiant (la température  $T_\infty$ , la masse volumique  $\rho_\infty$ ) et les caractéristiques descriptives du rejet de fumée (la vitesse  $v_f$  et la température  $T_f$ ) (relation (1.16)).

$$F_b = g v_f \left( \frac{D_{\text{feu}}}{2} \right)^2 \frac{T_f - T_\infty}{T_f} \quad (1.16)$$

Pour les incendies, une autre manière de définir  $F_b$  est de le considérer en fonction de la puissance convective dégagée par l'incendie (1.17). Cette relation sera utilisée par la suite.

$$F_b = g \left( \frac{1}{\rho_\infty T_\infty \pi C_\infty} \right) Q_c \quad (1.17)$$

Dans le cas de sources ponctuelles, des formules empiriques simples fournissent une estimation de la hauteur finale en fonction notamment de la flottabilité. Parmi ces formules, certaines fournissent une estimation de la hauteur finale du panache en supposant qu'elle est atteinte instantanément à la sortie de la source, avant tout mouvement horizontal du panache. D'autres formules utilisent un critère d'arrêt noté  $x_f$  pour marquer la fin de la phase transitoire d'élévation du panache. Nous nous intéressons à ce type de formule de surhauteur qui peut prétendre correspondre au mieux à la réalité physique associée à la mécanique des fluides.

De nombreux modèles de surhauteur ont été mis en place pour des applications de rejets industriels avec des hypothèses plus ou moins simplificatrices, tels que Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N. (2016), Holland et Stumke (Holland J. Z. , 1953), CONCAWE (Brummage K. G. , 1968), Briggs (Briggs G. A., 1984). Ce dernier est le plus utilisé, en particulier dû à sa prise en compte de la stabilité de l'atmosphère. Ces dernières années, plusieurs modèles d'élévation du panache ont été proposés pour des d'incendies (e.g., Baggio et al., 2022; Fisher, 2001;

Mack et al., 2023; Tohidi and Kaye, 2016; Węgrzyński et al., 2023) et peuvent être utilisés pour modéliser l'élévation du panache en amont de la simulation de dispersion de fumées. Fisher (2001) synthétise plusieurs formulations de surhauteur appliquées à des expériences pour des incendies de cuve ou *pool fire*<sup>2</sup>. En particulier, les modèles de surhauteur de Mills  $\Delta z_M(x)$  et Zonato  $\Delta z_{zo}(x)$  sont présentés en fonction de la distance à la source dans la direction du vent  $x$  et d'autres paramètres à prédéterminer.

Le modèle de Zonato et al. (1993)  $\Delta z_{zo}$  se traduit par la relation (1.18). Cette relation dépend de la puissance convectée de l'incendie  $Q_c$ , de la vitesse du vent à 10 m  $u_{10}$  et de la variable  $x$ . Les coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , et  $d$  sont fixés de manière empirique.

$$\Delta z_{zo}(x) = d x^a Q_c^b u_{10}^{-c}. \quad (1.18)$$

La formulation de Zonato et al. (1993) est définie par la relation (1.19) pour  $x < x_f$ ,

$$\Delta z_{zo}(x) = 0,38 x^{0,63} Q_c^{0,26} u_{10}^{-0,5}, \quad (1.19)$$

avec le critère d'arrêt  $x_f$  formulé par (1.20)

$$x_f = 45 D_{feu}. \quad (1.20)$$

Une correction des paramètres  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , et  $d$  est proposée dans (Fisher, 2001) par régression linéaire avec des observations de surhauteur. Ce dernier propose les ajustements suivants :  $a = 0,641 \pm 0,061$ ,  $b = 0,224 \pm 0,120$ ,  $c = 0,626 \pm 0,175$ , et  $d = 0,498(\times/\div)2$ .

Le modèle de Mills  $\Delta z_M$  (1.21b) propose une correction du modèle de Briggs  $\Delta z_B$  (1.21a) par la prise en compte du diamètre de la source et d'un coefficient d'inclinaison du panache dans la phase transitoire d'élévation (Fisher, 2001). L'objectif de cette correction est de limiter l'ascension du panache de fumée aux alentours de l'incendie (pour  $x < 100$  m). La formule de Mills est composée du coefficient  $\beta_{incl}$  qui correspond à l'inclinaison du panache et est fixé à 0,6, de la flottabilité, de la vitesse du vent à 10 m  $u_{10}$  et de la variable  $x$ . Pour les modèles de Briggs et Mills, l'analyse dimensionnelle impose  $a + b = 1$  et  $c = 3b$  et dans Fisher (2001),  $F_b$  est défini en fonction de la puissance de l'incendie.

$$\Delta z_B(x) = d x^a F_b^b u_{10}^{-c}, \quad (1.21a)$$

$$\Delta z_M(x) = \left( z_B(x) + \left( \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}} \right)^3 \right)^{1/3} - \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}}, \quad (1.21b)$$

Les formulations de Briggs G. A. (1984) et Mills M.T (1987) sont définies pour  $a = 2/3$ ,  $b = 1/3$ ,  $c = 1$  et  $d = (3/(2\beta_{incl}^2))^{1/3}$  par les relations (1.22b) et (1.22a), respectivement.

$$\Delta z_B(x) = \left( \frac{3}{3/2\beta_{incl}^2} \right)^{1/3} x^{2/3} F_b^{1/3} u_{10}^{-1}, \quad (1.22a)$$

$$\Delta z_M(x) = \left( \Delta z_B(x) + \left( \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}} \right)^3 \right)^{1/3} - \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}}, \quad (1.22b)$$

---

2. incendie d'une couche de carburant liquide

Fisher (2001) propose les ajustements suivants :  $a = 1,01 \pm 0,10$ ,  $b = 0,244 \pm 0,199$ ,  $c = 0,615 \pm 0,29$ , et  $d = 0,521(\times/\div)1,6$ . Par ailleurs, cette formule de Briggs (équation (1.22a)) est définie lorsque la stabilité de l'atmosphère est neutre ou instable avec un critère d'arrêt  $x_f$  (Briggs, 1982) décrit par la relation (1.23) (Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 2016)

$$x_f = \begin{cases} 49 F_b^{5/8} & \text{si } F_b < 55 \text{ m}^4 \cdot \text{s}^{-3} \\ 119 F_b^{2/5} & \text{si } F_b \geq 55 \text{ m}^4 \cdot \text{s}^{-3}. \end{cases} \quad (1.23)$$

Les formules de surhauteur (1.19) et (1.22a), (1.22b) sont considérées dans l'application qui suit avec leur critère d'arrêt.

Il est souvent difficile d'évaluer la performance de la modélisation de la surhauteur pour les incendies en raison des incertitudes significatives associées aux données d'entrée, telles que la puissance thermique et la surface du feu (Mallia et al., 2018; Martin et al., 2012). Le rapport Hall and Spanton (2003) remet notamment en question l'hypothèse d'une source ponctuelle pour définir l'émission d'un panache de fumée d'incendies depuis une source surfacique étendue, induisant une forte influence de la taille et de la forme de la source sur le comportement du panache. Dans la suite, une application est effectuée pour analyser les formules de surhauteur de Mills, Briggs et Zonato par rapport à plusieurs dimensions surfaciques d'incendies de grande ampleur.

## 1.4 Application à l'incendie de Notre Dame de Paris

Cette section présente une application sur l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame basée sur les travaux de l'INERIS (INERIS, 2019) et qui constitue un cas d'intérêt pour ce chapitre et les deux suivants. Le contexte et le scénario sont d'abord introduits, suivi d'une estimation de la surhauteur associée aux fumées d'incendie.

### 1.4.1 Contexte et scénario

L'incendie de la cathédrale de Notre-Dame s'est déclaré le 15 avril 2019 vers 17h00 UTC<sup>3</sup>, a été en phase de développement entre 17h00 et 18h00 UTC et pleinement développé entre 18h00 et 20h00 UTC (INERIS, 2019). Les périodes de temps sont horaires et définies de telle sorte que  $T_0$  représente la première heure d'émission des fumées,  $T_1$  la deuxième heure et ainsi de suite.

Une étude des données météorologiques réanalysées par le modèle AROME (Seity et al., 2011) de Météo France a permis de définir les conditions dispersives de cette journée. Cette étude révèle une vitesse de vent modérée ( $\sim 4 - 5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  à 10 m) le 15/04 à 17 :00 UTC puis diminue à  $\sim 3 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  à 19 :00 UTC jusqu'au 16/04 à 07 :00 UTC. Par ailleurs, la direction du vent est restée stable pendant la phase la plus intense de l'incendie avec un vent d'est-sud-est ( $110^\circ$ ) le 15/04 à 17 :00 UTC mesuré à la Tour Eiffel. La hauteur de mélange était de l'ordre de 1200 m au début de l'incendie et de 500 m le 16/04 à 07 :00 UTC, hauteur qui a permis une bonne dilution du panache. Enfin, l'atmosphère observée était instable. Les observations météorologiques révèlent des conditions dispersives pour le panache.

Dans le document INERIS (2019), l'INERIS estime la caractérisation du rejet de fumée pour l'incendie de la cathédrale Notre Dame de Paris. À partir des observations de hauteur de

3. L'heure UTC est décalée de -2 heures en période estivale pour la France (soit 17h UTC = 19h France)

flamme  $L = 25$  m et du diamètre représentatif de la source  $D_{\text{feu}} = 14$  m, on obtient la vitesse spécifique de combustion  $m'' = 80 \text{ g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$  par la relation (1.3). À partir de cette vitesse, de la chaleur de combustion du bois de  $\Delta C = 17 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ , d'un taux de rendement  $\eta = 1$  et de la surface en feu  $S_{\text{feu}} = 1700 \text{ m}^2$  (équivalente à un diamètre de  $D_{\text{feu}} = 46,5$  m), la puissance thermique totale  $Q_t$  dégagée par l'incendie pour la phase pleinement développée de l'incendie est exprimée par la relation (1.1) et est estimée à 2300 MW. En outre, le document (INERIS, 2019) suppose que la puissance totale pour la phase en développement vaut la moitié de la phase pleinement développée, soit 1150 MW. La puissance convectée  $Q_c$  est ensuite calculée à partir de la puissance totale (1.2) et du facteur  $\alpha_c = 0,67$ . On a donc  $Q_c \approx 750$  MW pour la phase en développement de l'incendie (pour la première heure  $T_0$ ) et  $Q_c \approx 1500$  MW pour la phase pleinement développée (à  $T_1$  et  $T_2$ ).

Nous pouvons à présent définir les caractéristiques des fumées et du terme source à partir de la puissance convectée.

## 1.4.2 Estimation de la hauteur effective

Nous déterminons la hauteur effective atteinte par le panache de fumée. Pour ce faire, la hauteur d'émission au niveau de la source est dans un premier temps calculée. Une analyse de sensibilité des formules de surhauteur de Briggs, Mills et Zonato est ensuite effectuée pour différentes surfaces en feu.

La hauteur d'émission au niveau de la source est calculée par la relation (1.10). La valeur de  $\Delta T_{ax}$ , représentant l'augmentation de la température au niveau de la ligne médiane du panache, est définie égale à 500 K d'après (INERIS, 2019). Pour les deux puissances convectives précédemment introduites, nous avons :

- Avec  $Q_c = 750$  MW :  $z_s = 37$  m
- Avec  $Q_c = 1500$  MW :  $z_s = 49$  m

En complément du paramètre  $z_s$ , les modèles de surhauteur de Briggs (1.22a), Mills (1.22b) et Zonato (1.19) permettent d'obtenir la hauteur finale atteinte par les fumées. Ces modèles dépendent de paramètres à prédéfinir pour calculer la surhauteur en fonction de la distance  $x$  parcourue dans la direction du vent :

- pour Mills :
  - $F_b$  en  $\text{m}^4\cdot\text{s}^{-3}$ , défini en fonction de la puissance  $Q_c$  (en kW) (1.17);
  - $D_{\text{feu}}$  en m, permettant une correction de la formule de Briggs près de la source;
  - $u_{10}$  en  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ , la valeur du vent à 10 m d'altitude au niveau de la source;
- pour Zonato :
  - $Q_c$  en kW;
  - $u_{10}$  en  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ;
  - $D_{\text{feu}}$  en m.

Dans la suite de l'application, les valeurs de puissance convective sont utilisées pour la modélisation de la surhauteur avec la formulation de Zonato (1.19) et les valeurs de flottabilité liées à la puissance convective sont utilisées pour la modélisation des surhauteur de Mills (1.21b) et de Briggs (1.21a). Le critère d'arrêt en condition d'atmosphère instable (1.23) est utilisé pour les formules de Briggs et Mills. Par ailleurs, le terme de flottabilité est strictement supérieur à  $55 \text{ m}^4\cdot\text{s}^{-3}$  à partir d'une puissance convective de 6 MW. Les formules de

surhauteur sont donc les suivantes :

$$\Delta z_B(x) = \begin{cases} \left(\frac{3}{3/2\beta_{incl}^2}\right)^{1/3} x^{2/3} F_b^{1/3} u_{10}^{-1} & \text{si } x < x_f = 119 F_b^{2/5} \\ 24, 2 \left(\frac{3}{3/2\beta_{incl}^2}\right)^{1/3} F_b^{3/5} u_{10}^{-1} & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\Delta z_M(x) = \begin{cases} \left(\Delta z_B(x) + \left(\frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}}\right)^3\right)^{1/3} - \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}} & \text{si } x < x_f = 119 F_b^{2/5} \\ \left(\Delta z_B(x) + \left(\frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}}\right)^3\right)^{1/3} - \frac{D_{feu}}{2\beta_{incl}} & \text{sinon} \end{cases}$$

et

$$\Delta z_{zo}(x) = \begin{cases} 0, 38 x^{0,63} Q_c^{0,26} u_{10}^{-0,5} & \text{si } x < x_f = 45 D_{feu} \\ 4, 2 D_{feu}^{0,63} Q_c^{0,26} u_{10}^{-0,5} & \text{sinon} \end{cases}$$

Pour les trois modèles, une vitesse de vent moyenne  $u_{10}$  de  $5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  (à une altitude de 10 mètres) est considérée ainsi que trois valeurs de diamètres de la source 35 m, 50 m et 70 m équivalents à une surface de  $1000 \text{ m}^2$ ,  $2000 \text{ m}^2$  et  $4000 \text{ m}^2$ , respectivement. Ces dernières sont des surfaces rencontrées lors d'études d'incendies de grande ampleur.

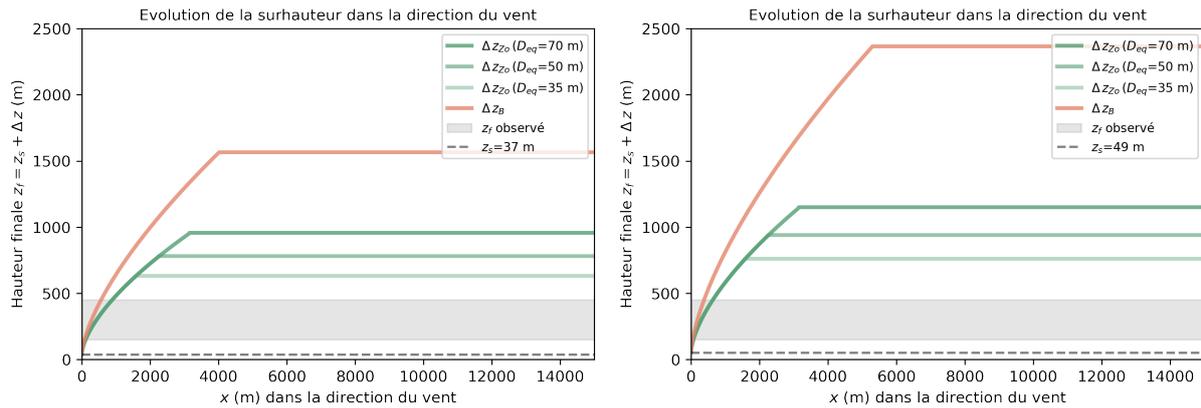
Dans un premier temps une évaluation de la modification apportée par Mills par rapport à Briggs est effectuée. Les résultats obtenus par la modélisation de la surhauteur aux distances  $x = 100 \text{ m}$  et  $x = x_f$  par rapport à la source dans la direction du vent sont disponibles dans le tableau 1.1. Les résultats pour les deux puissances convectives y sont reportés pour les différents diamètres de source considérés.

$Q_c$ (MW)	$\Delta z_B$		$\Delta z_M$					
	$x = 100 \text{ m}$	$x = x_f$	$D_{feu} = 35 \text{ m}$		$D_{feu} = 50 \text{ m}$		$D_{feu} = 70 \text{ m}$	
	$x = 100 \text{ m}$	$x = x_f$	$x = 100 \text{ m}$	$x = x_f$	$x = 100 \text{ m}$	$x = x_f$	$x = 100 \text{ m}$	$x = x_f$
750	130	1528	102	1499	90	1486	70	1470
1500	164	2316	135	2287	123	2274	108	2258

Table 1.1 – Résultats de l'application de la surhauteur de Briggs  $\Delta z_B$  et de Mills  $\Delta z_M$  pour  $x = 100 \text{ m}$  et  $x = x_f$ , pour différents diamètres  $D_{feu}$ , et pour les deux puissances convectives considérées. Pour  $Q_c = 750 \text{ MW}$ ,  $x_f = 4018 \text{ m}$  et pour  $Q_c = 1500 \text{ MW}$ ,  $x_f = 5302 \text{ m}$ .

Nous remarquons que les surhauteurs résultantes du modèle de Mills sont d'autant plus importantes que le diamètre est faible et ce, aux alentours de la source (à  $x = 100 \text{ m}$ ) ainsi qu'à  $x = x_f$ . Cependant, à la fin de la phase transitoire, les différences observées sont relativement peu significatives (1470 m *versus* 1499 m). La surhauteur calculée avec le modèle de Briggs est plus élevée que celle de Mills obtenue avec le plus petit diamètre considéré. Comme précédemment, cette différence est toutefois peu significative une fois le panache stabilisé. Ces tendances sont similaires pour les deux puissances étudiées, en phase de développement et en phase pleinement développée.

Les résultats de surhauteur sont dans un second temps comparés par rapport à la hauteur effective observée reportée dans le document INERIS (2019); entre 150 m et 450 m. Les modèles de surhauteur de Zonato (1.19) et Briggs (1.22a) sont considérés avec leur critère d'arrêt pour les deux puissances  $Q_c = 750 \text{ MW}$  et  $Q_c = 1500 \text{ MW}$  et avec une valeur de vitesse de vent moyenne de  $u_{10} = 5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  (à une altitude de 10 mètres). Les résultats obtenus par la modélisation de la surhauteur sur 15 km de distance à la source dans la direction du vent sont disponibles dans la figure 1.6 pour la puissance convective de 750 MW (à gauche) et de



(a) Résultat de hauteur finale pour  $Q_c = 750$  MW (b) Résultat de hauteur finale pour  $Q_c = 1500$  MW

Figure 1.6 – Résultat de l’application de la surhauteur de Briggs, Mills et Zonato sur 15 km dans la direction du vent. La zone grisée représente la hauteur finale estimée dans (INERIS, 2019).

1500 MW (à droite). Pour des diamètres  $D_{feu}$  compris entre 35 m et 70 m, la surhauteur de Zonato se stabilise entre 590 m et 920 m pour une puissance de 750 MW et entre 700 m et 1100 m pour une puissance de 1500 MW. À la fin de la phase transitoire, la surhauteur de Briggs est de 30% à 50% supérieure à la surhauteur de Zonato pour les diamètres considérés.

Outre la surhauteur, la hauteur d’émission au niveau de la source se situe à 35 m pour une puissance de 750 MW et à 50 m pour une puissance de 1500 MW. La hauteur effective calculée à partir des modèles de Briggs, ainsi que Mills et Zonato pour des diamètres de source compris entre 35 m et 70 m, est systématiquement surestimée par rapport aux observations rapportées dans le document INERIS (2019).

## Synthèse

Ce chapitre a permis d'analyser la corrélation entre le feu et les fumées d'incendie. De nombreux modèles d'incendie peuvent aboutir à la constitution du rejet de fumée mais nécessitent un certain nombre de données d'entrée qui s'avèrent incertaines pour les incendies de grande ampleur. Des corrélations empiriques simples permettent de définir les paramètres caractéristiques de la source de fumée en fonction de la puissance thermique de l'incendie. La puissance thermique est la caractéristique principale d'un incendie et peut être déterminée au moyen de données observables.

Les suies sous forme particulaire formées lors d'un incendie constituent la substance polluante cible de ces travaux. La formulation générale du débit de polluants a été définie dans ce chapitre et dépend de la vitesse spécifique de combustion, de la surface en feu et du taux de production du polluant. Par ailleurs, les caractéristiques des fumées sont la hauteur effective de l'émission, composée de la hauteur d'émission au niveau de la source et de la surhauteur, du débit des fumées, ainsi que de la température moyenne et la vitesse d'éjection moyenne déterminées à partir du débit des fumées et qui peuvent être utiles pour la modélisation du phénomène de surhauteur. Une autre manière de modéliser la surhauteur consiste à considérer la puissance de l'incendie en tant que donnée d'entrée.

Ces corrélations ont été appliquées pour la caractérisation de la hauteur d'émission effective du polluant contenu dans les fumées de l'incendie de Notre-Dame sur la base du document INERIS (2019). Les formules de surhauteur de Mills et de Briggs en fonction d'un terme de flottabilité lié à la puissance thermique ont été appliqués sur cet incendie ainsi que la formule de Zonato en fonction de la puissance thermique. Il en résulte que les surhauteurs issues des formulations de Mills et de Briggs donnent des résultats quasi-équivalents une fois le critère d'arrêt atteint. À cette distance, les surhauteurs estimées avec ces formules sont de 30% à 50% plus élevées que la surhauteur obtenue par la formule de Zonato. Globalement, pour des diamètres de source compris entre 35 m et 70 m, tous les modèles surestiment la surhauteur par rapport aux observations visuelles.

Les caractéristiques des fumées, en termes de hauteur finale d'émission et de débit des polluants émis, dépendent de paramètres incertains. En particulier, la puissance thermique d'un incendie ainsi que le taux de production du polluant sont des données difficiles à quantifier, *a fortiori* en situation d'urgence. Par conséquent, la mise en œuvre d'une méthode d'assimilation de données basée sur la modélisation de la dispersion atmosphérique est discutée dans les chapitres suivants dans le but de reconstituer la hauteur finale atteinte par le panache et le débit du polluant.

## Chapitre 2

# Dispersion atmosphérique de fumées d'incendie

La modélisation de la dispersion atmosphérique des polluants est une méthode utilisée pour évaluer la propagation des concentrations de polluants dans l'atmosphère et leur impact sur la qualité de l'air, la santé et l'environnement. En particulier, la simulation de la dispersion des substances toxiques issus d'incendies de grande ampleur concerne des événements ponctuels et peut permettre d'orienter des stratégies de prélèvement.

Cette méthode est basée sur la compréhension des mouvements d'air pour simuler la dispersion des polluants et est donc directement liée à la dynamique de l'écoulement atmosphérique. L'évolution des concentrations de polluants dans l'atmosphère dépend d'un certain nombre de processus qui influencent la masse présente dans l'atmosphère et la façon dont elle se déplace et se disperse. Il s'agit notamment des flux d'émission de polluants, leur transport dans l'atmosphère par advection et diffusion, leurs transformations chimiques et leur retrait par les précipitations ainsi que les interactions avec le sol, notamment par l'absorption par les plantes et le dépôt sur le sol et les bâtiments.

Dans ces travaux, nous nous intéressons à la modélisation du transport de particules dans l'atmosphère et leur processus de perte (dépôt au sol) suite à des incendies de grande ampleur.

Les processus descriptifs de l'écoulement atmosphérique sont d'abord définis en section 2.1 pour une échelle spatio-temporelle relative à l'évolution des fumées d'incendie dans l'atmosphère. Ensuite, l'approche de modélisation de la dispersion atmosphérique utilisée dans ces travaux est détaillée dans la section 2.2 pour un polluant non réactif. En particulier, la modélisation de l'écoulement, la modélisation de la dispersion par approche lagrangienne et la modélisation du dépôt sec qui constitue le seul processus de perte dans les cas étudiés, sont présentés. Enfin, une étude des différences d'écoulement météorologique entre les données d'analyse et de prévision sur les concentrations simulées est effectuée pour le cas de l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame de Paris en section 2.3 de ce chapitre.

### 2.1 Phénoménologie

L'évolution des polluants issus d'un incendie de grande ampleur dépend d'une variété de phénomènes atmosphériques qui ont des gammes d'échelles caractéristiques, spatiales et temporelles, très larges. Dans cette section nous dimensionnons la structure spatiale et temporelle de notre problématique ainsi que les phénomènes atmosphériques attendants à modéliser.

## 2.1.1 Structure atmosphérique

L'atmosphère est l'enveloppe gazeuse qui entoure certains corps célestes tels que la Terre, Vénus et Mars. Les gaz sont retenus autour de ces corps célestes par la force de gravité qui les empêche de s'échapper dans l'espace (Malardel, 2009). L'atmosphère est divisée en plusieurs couches en fonction du profil vertical de la température (Bruno Sportisse, 2008). L'épaisseur de l'atmosphère dépend notamment de l'activité solaire. Cette épaisseur fluctue entre 350 et 800 km avec une épaisseur moyenne d'environ 600 km. La figure 2.1 illustre cette stratifi-

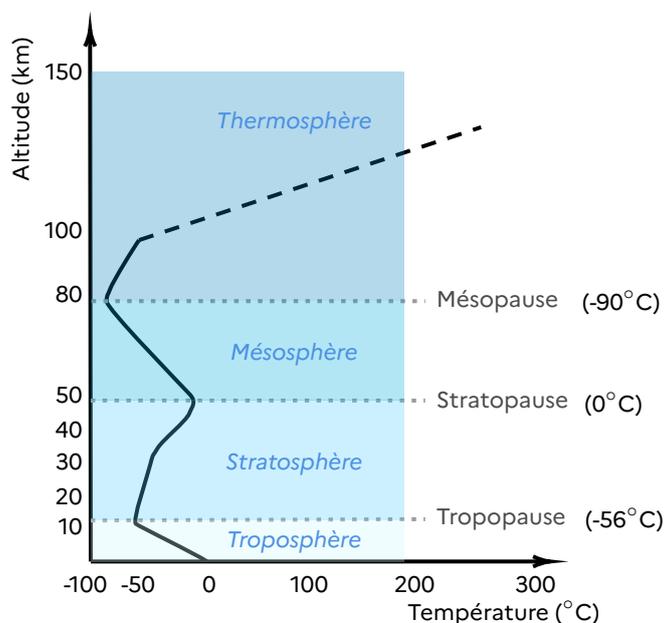


Figure 2.1 – Structure verticale de l'atmosphère. Adapté de (Malardel, 2009)

cation. La première partie de l'atmosphère (la plus proche du sol) est la troposphère, située entre 8 et 18 km d'altitude. Cette partie se caractérise par une diminution de la température avec l'altitude. Au-dessus, c'est la stratosphère, jusqu'à environ 50 km, où le gradient de température s'inverse et devient positif, notamment grâce à l'absorption du rayonnement solaire par l'ozone.

### Couche limite atmosphérique

Dans ces travaux, l'étude de la dispersion atmosphérique des polluants se concentre dans la troposphère, en particulier dans la couche limite atmosphérique (CLA ou "couche limite"). Cette dernière correspond à la couche de la troposphère directement soumise à l'influence de la surface terrestre. La description de son écoulement, en particulier du processus de mélange, est présentée plus en détail dans la section 2.1.2. Par ailleurs, la partie de l'atmosphère située au-dessus de la couche limite est appelée "troposphère libre" (Hanna S. R., et al, 1982; Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 2016). Les conditions d'atmosphère libre sont en moyenne proches du vent géostrophique qui correspond à l'équilibre des forces de Coriolis et des forces de pression, libre de l'influence du sol.

La couche limite est en principe subdivisée en deux couches distinctes : la couche de surface (CLS) (environ 10% de la hauteur de la couche limite) et la couche d'Ekman. Cette dernière est définie de l'atmosphère libre à la CLS, la direction et le module du vent moyen horizontal y varient avec l'altitude (spirale d'Ekman). La couche de surface est la couche pour

laquelle la direction du vent ne varie plus significativement avec l'altitude. Il y existe une sous-couche rugueuse située à proximité immédiate du sol dans laquelle intervient l'étape finale du phénomène de dépôt sec en interaction avec celui-ci. La phénoménologie de la CLA est complexe car elle est directement affectée par le cycle diurne (alternance jour/nuit). Le cycle

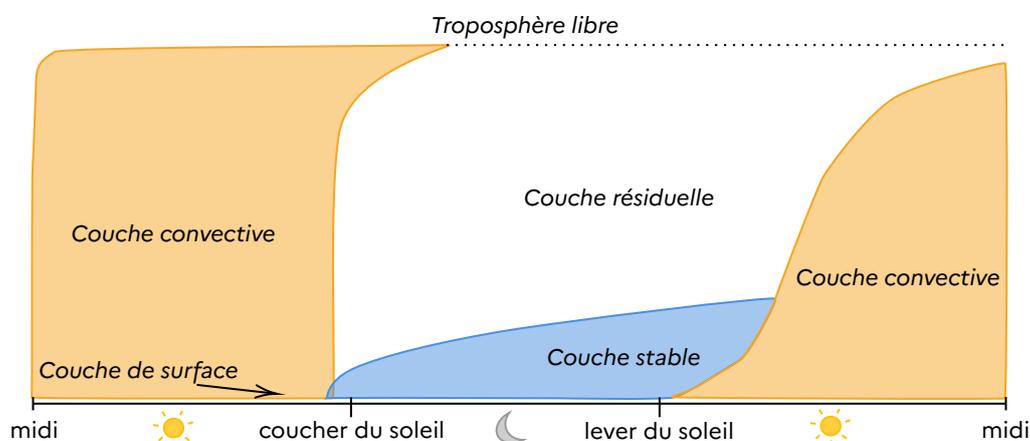


Figure 2.2 – Évolution de la stabilité de la CLA au cours de la journée.

diurne crée des couches convectives, résiduelles et stables dans l'atmosphère, représentées sur la figure 2.2.

Il existe, dans la CLA, deux principales échelles spatiales caractéristiques des phénomènes atmosphériques : la micro-échelle ( $< 1$  km) et la méso-échelle (1–1000 km) qui correspondent aux phénomènes atmosphériques prédominants dans le transport des polluants aux échelles locales et régionales. Au-dessus de la couche limite atmosphérique se situent des mouvements synoptiques qui correspondent typiquement au transport de polluants à l'échelle intercontinentale ( $10^4$  km). Les phénomènes atmosphériques associés aux échelles spatiales et temporelles de ces travaux définis dans la CLA sont détaillés dans la section suivante 2.1.2.

### Échelles considérées

Nous nous intéressons à présent à la structure horizontale à laquelle est soumise l'évolution de la pollution résultante des incendies étudiés. À proximité immédiate de l'incendie (dans un rayon d'environ 1 km), la mécanique des effondrements multiples des structures du bâtiment en feu est susceptible de provoquer une pollution locale importante qui n'est pas assimilable à la mécanique des fluides. Ainsi, de nombreux effondrements de grandes structures et des foyers locaux ou secondaires (Kelly et al., 2021 ; Khan et al., 2023), dans le voisinage immédiat du bâtiment en feu, peuvent générer de fortes émissions au sol ayant un impact qui n'est pas pris en compte par la phénoménologie des processus atmosphériques évoqués précédemment. Par conséquent, ces travaux concernent l'impact des fumées d'incendie de 1 à plusieurs dizaines de kilomètres de la source dans la direction du vent, dans l'optique d'une élaboration de stratégie de prélèvement en extérieur (par opposition à la qualité de l'air "en intérieur" de bâtiments).

La zone de prédilection du LCPP est la région Île-de-France ; les incendies concernés se déclarent donc majoritairement dans une zone urbaine. Les obstacles présents dans les zones urbaines exercent une résistance sur le vent et conduisent à une augmentation de la turbulence, causée par les influences en aval des structures urbaines, ce qui a pour effet de ralentir

localement le flux de vent moyen. De plus, les bâtiments ont la capacité de dévier le flux moyen de l'atmosphère dans des directions horizontales ou verticales, modifiant ainsi la trajectoire des particules portées par l'écoulement. Par conséquent, les éléments, tels que la surface terrestre ou les bâtiments, peuvent jouer un rôle important pour la modélisation de la dispersion atmosphérique en milieu urbain (Defforge, 2019). Cependant, la zone d'intérêt de l'étude de l'ordre de 10 km et le rejet de fumées d'incendie s'effectue en hauteur ( $\sim$  plus de 100 m). L'influence du bâti intervient ainsi localement lors de la retombée des fumées. La prise en compte des données du bâti est négligée dans la suite et fait l'objet d'une perspective de ces travaux. Les données d'occupation des sols ainsi que les données de topographie sont en revanche considérées.

Quant à l'échelle temporelle, elle est de l'ordre de plusieurs heures, voire de plusieurs jours à compter du début de l'incendie. Cette échelle de temps est *a priori* pertinente pour traiter les transformations physico-chimiques des particules atmosphériques imputables notamment aux processus de coagulation et de condensation/évaporation. La coagulation est néanmoins davantage associée à un changement dans la distribution en taille des particules qui composent le panache de fumées, qu'à un changement dans la masse transportée si l'on ne suit qu'un indicateur agrégé en taille comme les  $PM_{10}$ . La condensation et l'évaporation seront influencées par les conditions météorologiques et de combustion de façon complexe (Sakamoto et al., 2016). Dans ces travaux, nous considérons que la variabilité induite par les transformations physico-chimiques des particules est négligeable au regard des incertitudes globales associées au rejet (Hodshire et al., 2019). Dans la suite, les espèces sont considérées inertes et le dépôt comme l'unique processus de perte de la masse transportée.

## 2.1.2 Advection-diffusion

Au sein de la CLA, les polluants émis sont dispersés plus ou moins rapidement selon deux phénomènes. Le premier est le transport horizontal par le champ de vent qui explique le déplacement des polluants les plus stables sur de longues distances. Le vent vertical étant négligeable, le second mécanisme est le mélange vertical par la turbulence atmosphérique, c'est-à-dire des mouvements tourbillonnaires balayant une large gamme d'échelles, liés aux effets de couche limite qui mélangent les polluants verticalement. Ces processus définissent "l'advection-diffusion" des polluants dans l'atmosphère. La turbulence est un effet généré dans la CLA par la présence de la surface terrestre et est un concept essentiel à comprendre dans la dispersion atmosphérique étant donné son fort impact sur l'évolution de la concentration d'un polluant dans l'atmosphère. En pratique, on peut distinguer la turbulence d'origine mécanique et la turbulence d'origine thermique parmi les processus de mélange.

La turbulence, d'origine mécanique et/ou thermique, est responsable de la dilution des polluants et donc de la baisse des concentrations de polluants en aval des sources. Les mouvements turbulents dont la taille caractéristique est du même ordre de grandeur que celle du panache sont ceux qui contribuent le plus à la dispersion du panache. En pratique, un panache de polluants est toujours dispersé dans l'atmosphère car il y a toujours des "tourbillons" plus petits que la taille du panache de fumée (Bruno Sportisse, 2008). L'efficacité du mélange turbulent dépend donc à la fois de la turbulence et de l'échelle caractéristique du panache de polluants qui varie en fonction de la distance par rapport à la source. Ces processus de mélange peuvent être appréhendés en considérant les profils verticaux de la vitesse du vent et de la température et sont présentés ci-après.

La turbulence d'origine mécanique intervient dans la CLS où la force de Coriolis devient

négligeable. Cette turbulence correspond au cisaillement du vent dû au frottement sur le sol. Le profil du vent y est complexe en raison de l'adhérence du flux atmosphérique au niveau de la surface. Une manière de le définir est de considérer, pour un vent moyen  $\bar{u}$ , un profil vertical de vitesse du vent (2.1) en fonction de l'altitude dans la CLS,

$$\frac{\partial \bar{u}}{u^*} = \frac{\partial z}{z} \frac{1}{\kappa}, \quad (2.1)$$

avec  $\kappa$  la constante de *von Kármán* et  $u_*$  la vitesse de friction. L'intégration de (2.1) entre les altitudes  $z_1$  et  $z_2$  conduit à une loi logarithmique (2.2).

$$\bar{u}(z_2) - \bar{u}(z_1) = \frac{u^*}{\kappa} \ln \left( \frac{z_2}{z_1} \right). \quad (2.2)$$

En définissant la longueur de rugosité  $z_0$  comme la hauteur à laquelle le vent moyen est annulé par l'effet de la rugosité, nous pouvons alors déterminer le profil de vent (2.3).

$$\bar{u}(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) \quad (2.3)$$

Ainsi, ce profil logarithmique décrit l'effet du cisaillement de la vitesse du vent et permet de décrire l'écoulement atmosphérique dans la CLS en cas d'atmosphère neutre. Cette dernière notion est explicitée dans la section suivante.

Outre la turbulence mécanique, il existe, dans la CLA, de la turbulence d'origine thermique liée au gradient vertical de température potentielle, en particulier induit par le cycle diurne (le sol se réchauffe le jour et se refroidit la nuit). A l'échelle du continuum, qui est la plus petite échelle à partir de laquelle le fluide peut être considéré comme un milieu continu, le paramètre température est caractéristique de l'agitation des particules dans une parcelle d'air. En pratique, la température potentielle  $\theta$  est utilisée pour décrire la température de l'atmosphère et correspond à la température corrigée des différences de pression avec la hauteur (équation (2.4)), avec  $R_{\text{air}}$  la constante des gaz parfaits pour l'air et  $C_p$  la capacité thermique massique à pression constante de l'air.

$$\theta(z) = T(z) \left( \frac{P(z)}{P_0} \right)^{R_{\text{air}}/C_p} \quad (2.4)$$

Ce raisonnement est valable pour l'air sec. Lorsque l'air est chargé d'humidité, il est nécessaire de corriger les variations dues à cette humidité. Un raisonnement similaire est alors applicable à la température potentielle virtuelle  $\theta_v$ <sup>1</sup>. Dans une atmosphère adiabatique, la température potentielle est constante en fonction de la hauteur. En pratique, l'atmosphère n'est pas toujours adiabatique et le profil de la température potentielle détermine la stabilité des couches de l'atmosphère : si  $\frac{\partial \theta_v}{\partial z} < 0$ , la couche est instable et si  $\frac{\partial \theta_v}{\partial z} > 0$ , la couche est stable.

La température potentielle est la température hypothétique que prendrait une parcelle d'air si elle était abaissée au niveau de la mer par compression adiabatique. La notion de température potentielle permet de comparer des parcelles d'air provenant de différentes hauteurs dans la masse d'air. Connaître l'évolution de la température potentielle donne l'état de la stabilité de l'atmosphère.

---

1. correction de la température par la considération de l'humidité spécifique  $H_0 : \theta_v = \theta + 0,61 H_0 \theta$

## Notion de stabilité

La stabilité de l'atmosphère découle d'une variation dans le profil de température potentielle. Plus la température est basse, plus la parcelle d'air est dense, et plus la température est élevée, moins la parcelle d'air est dense. Lorsque deux parcelles d'air de températures différentes sont juxtaposées verticalement, un effet de poussée liée aux effets de la flottabilité (qui représente la conjonction de la force de gravité et de la poussée d'Archimède pour un fluide) apparaît donc : la parcelle d'air chaud subit un effet ascendant par rapport à la parcelle d'air froid. Cet effet génère des turbulences (mélange d'air) et est caractéristique de la stabilité atmosphérique. Il existe trois états de stabilité des couches atmosphériques en fonction du gradient vertical de température :

- neutre, la turbulence est uniquement d'origine mécanique ;
- instable, dans laquelle les polluants sont fortement brassés par la turbulence principalement d'origine thermique ;
- stable, souvent nocturne, où la turbulence mécanique est amortie par la stratification thermique et les polluants ne sont que faiblement dispersés verticalement.

Ces trois états de stabilité permettent de caractériser l'état d'agitation d'une couche atmosphérique dans la CLA.

Plusieurs couches atmosphériques de stabilité différente peuvent composer la CLA, notamment avec des couches d'inversion près du sol générées par le cycle diurne. Une couche d'inversion est une couche d'air présentant un gradient potentiel de température positif. Elle peut se trouver à n'importe quelle altitude. En général, une couche d'inversion peut se produire de quatre façons différentes (Malardel, 2009) :

1. par la descente et le réchauffement de l'air dans la colonne d'air au-dessus d'un anticyclone, on parle d'inversion de subsidence ;
2. par le refroidissement de l'air près du sol au cours de la nuit, on parle d'inversion nocturne ;
3. par le passage d'une masse d'air sur une surface froide, on parle d'inversion d'advection ;
4. par le passage d'une masse d'air chaud à partir d'un front chaud sur une masse d'air froid, on parle d'inversion frontale.

La hauteur  $z_i$  définit la hauteur à laquelle le gradient vertical de température s'inverse. La figure (2.3) montre l'inversion de température pour le jour (à gauche) et la nuit (à droite). Le cycle diurne est en partie responsable de la stratification de l'atmosphère. Le réchauffement de l'atmosphère est provoqué par la réflexion du rayonnement solaire et surtout la transmission de chaleur absorbée par le sol vers l'air. Cette stratification de l'atmosphère se traduit par plusieurs couches stables/instables et peut s'étendre sur plusieurs kilomètres.

Les situations en cas dits instables et stables nécessitent une correction des équations descriptives de la turbulence mécanique. En particulier, l'équation (2.3) devient (2.5) pour laquelle le cas neutre est défini lorsque  $\Phi = 0$ .

$$\bar{u}(z) = \frac{u^*}{\kappa} \ln \left( \frac{z}{z_0} + \Phi \left( \frac{z}{L_{MO}} \right) \right) \quad (2.5)$$

Où une manière classiquement utilisée pour définir  $\Phi$  est issue des relations de Businger et al. (1971) et  $L_{MO}$  est la longueur de Monin-Obukhov.

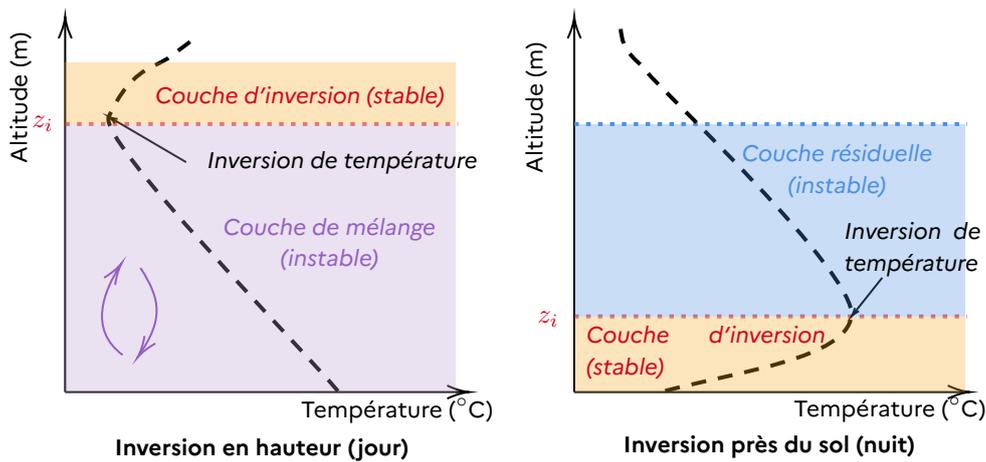


Figure 2.3 – Représentation de l'inversion de température : inversion en hauteur le jour ( $z_i$  de l'ordre de 100 m à gauche) et inversion près du sol la nuit ( $z_i$  de l'ordre de 10 m à droite).

La longueur de Monin-Obukhov est le rapport de la production de turbulence due au cisaillement du vent  $p_c$  par rapport à la production/consommation d'énergie cinétique turbulente due à la flottabilité  $p_f$  que multiplie  $z_0$  la longueur de rugosité (relation (2.6)).

$$L_{MO} = -z_0 \frac{p_c}{p_f} \quad (2.6)$$

avec  $p_c = u^{\star 3}/(\kappa z_0)$  et  $p_f = g/\theta_v(Q_0 + 0,61 \theta E_0)$ ,  $Q_0$  le flux cinématique de chaleur sensible et  $E_0$  le flux cinématique d'évaporation. La longueur de Monin-Obukhov est souvent utilisée pour définir la notion de stabilité qui découle de l'influence de la stratification thermique sur la turbulence et conduit ainsi à distinguer les différentes conditions atmosphériques (stable -  $L_{MO} > 0$ ; instable -  $L_{MO} < 0$ ; neutre -  $L_{MO} \rightarrow \pm\infty$ )

### 2.1.3 Processus de perte

En plus des émissions et du transport dans l'atmosphère, de nombreuses espèces peuvent subir des processus de perte liés au dépôt humide (lessivage par la pluie ou à l'intérieur des nuages) et au dépôt sec à la surface du sol (dû notamment à l'absorption par les végétaux). Dans ces travaux, le lessivage n'est pas considéré étant donné l'absence de pluie lors des incendies d'intérêts. Le dépôt sec est donc l'unique processus de perte pris en compte dans ces travaux. Il est dû à la captation par les éléments de surface (les plantes, les bâtiments, le sol,...) d'une partie des polluants présents dans l'air. Cette captation induit un flux diffusif vers la surface. Pour les particules les plus pesantes, le flux sédimentaire se juxtapose à ce flux diffusif. L'échelle caractéristique de variabilité spatiale du dépôt sec peut être de quelques mètres, voire de quelques centimètres.

La diffusion de la concentration d'un polluant est régie par l'équation (2.7) avec  $K$  le coefficient vertical de diffusion d'une concentration  $c$  et où le flux de dépôt est représenté par  $-K\partial c/\partial z$ .

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left( -K \frac{\partial c}{\partial z} \right) = 0 \quad (2.7)$$

On introduit communément la vitesse de dépôt sec, notée ici  $w$ , en supposant que le flux

de dépôt sec  $F_{\text{dry}}$  (2.8) est proportionnel à la concentration du polluant  $c$ .

$$F_{\text{dry}} = w(z) \times c(z) \quad (2.8)$$

Dans la littérature, la formule généralement utilisée pour exprimer la vitesse de dépôt sec totale  $w$  consiste à combiner la vitesse de sédimentation  $w_s$  avec la vitesse dit "de diffusion"  $w_d$  (Venkatram and Pleim, 1999) par la relation (2.9).

$$w(z) = \frac{w_s}{1 - \exp\left(-\frac{w_s}{w_d(z)}\right)}, \quad (2.9)$$

Les vitesses de dépôt dépendent du diamètre des particules. Lors d'un incendie, des particules de différentes tailles sont émises dans l'atmosphère, en particulier de la suie. La vitesse de dépôt des particules de petit diamètre tend vers  $w_d$  tandis que la vitesse de dépôt des particules de grand diamètre tend vers  $w_s$ .

Les processus impliqués dans le dépôts secs par diffusion et par sédimentation sont décrits dans la figure (2.4). L'estimation des dépôts par diffusion dépend des conditions météorologiques et est donc plus complexe à évaluer que la sédimentation. Le dépôt sec par diffusion est fonction de la turbulence atmosphérique, des caractéristiques des polluants et des caractéristiques de la surface.

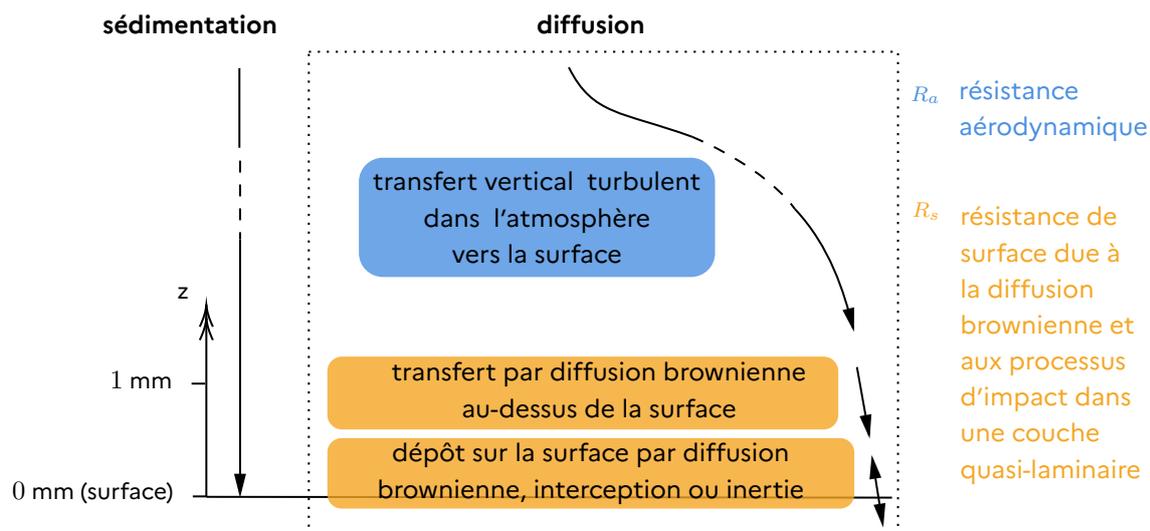


Figure 2.4 – Processus intervenant dans le dépôt sec en fonction de l'altitude  $z$  pour les particules.

Il se décompose en une succession d'étapes : i- transfert vertical turbulent dans l'atmosphère vers la surface (en bleu) et ii- transfert par diffusion brownienne et captation par la surface (en orange) dans la couche quasi-laminaire près du sol. Les processus impliqués dans la couche quasi-laminaire sont décrits dans la figure 2.5.

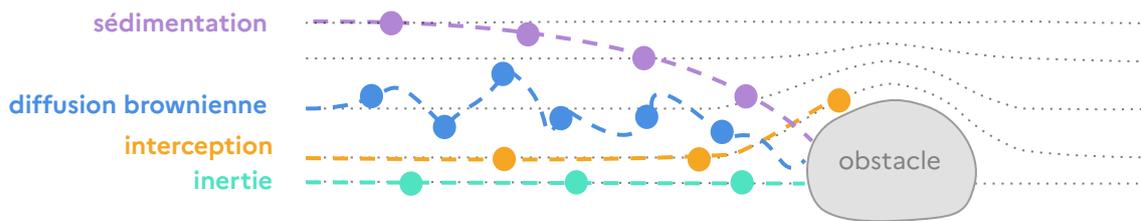


Figure 2.5 – Processus intervenant dans la représentation du dépôt sec dans la couche quasi-laminaire.

On introduit généralement la notion de résistance au dépôt pour représenter ces différentes étapes et les processus associés. La vitesse de diffusion est donc régie par la résistance aérodynamique et la résistance de surface à travers la diffusion brownienne, l'interception et l'inertie. Ces résistances peuvent être modélisées et font l'objet de la section 2.2.3.

## 2.2 Modélisation de la dispersion atmosphérique

La modélisation de la dispersion atmosphérique a pour objet de prévoir la concentration des polluants dans l'atmosphère en considérant, dans notre cas, l'émission des polluants, leur transport dans l'atmosphère et leur interaction avec le sol.

La simulation numérique de l'écoulement et de la dispersion atmosphérique peut être réalisée à l'aide d'un large éventail d'outils de modélisation. Ceux-ci vont de la simulation numérique directe de la turbulence à toutes les échelles (e.g., Coceal et al., 2014, 2006) ou les *Large-Eddy Simulation* (e.g., Boppana et al., 2011; Moon et al., 2014; Xie and Castro, 2008) permettant une analyse précise de la structure de l'écoulement et de son impact sur la dispersion des polluants (voire éventuellement des interactions avec celle-ci), à des approches simplifiées utilisables en opérationnel (e.g., Gariazzo et al., 2014; Soulhac et al., 2016; Trini Castelli et al., 2018). La méthode proposée dans ce travail, destinée à être utilisée dans un contexte opérationnel, est basée sur un outil de modélisation appartenant à cette dernière catégorie.

Il existe trois approches pour la modélisation de la dispersion atmosphérique : l'approche gaussienne, eulérienne et lagrangienne (Hanna S. R., et al, 1982; Rodean, 1996). Il est par ailleurs possible de coupler ces approches pour optimiser la représentation de la dispersion atmosphérique. Un des avantages d'un modèle lagrangien est qu'il peut suivre finement une émission ponctuelle avec peu de diffusion numérique. De plus, sans considération des réactions physico-chimiques, cette approche permet de représenter seulement la trajectoire du panache, réduisant ainsi le coût de calcul par rapport à une approche où il est nécessaire de résoudre finement les équations sur le domaine simulé tout entier. Le modèle utilisé dans ces travaux est le modèle PMSS (Parallel Micro Swift and Spray) (Moussafir et al., 2004; Odrini et al., 2017; Tinarelli et al., 2007) schématisé dans la figure 2.6. Il s'agit d'une chaîne de modèles constituée d'un modèle CFD simplifié (Micro Swift) et d'un modèle lagrangien à particules (Micro Spray).

La modélisation de l'écoulement propre à Swift est dans un premier temps abordée, suivie de l'approche lagrangienne pour la modélisation de la dispersion des particules. La modélisation du dépôt sec par approche lagrangienne est ensuite abordée ainsi que la modélisation de la vitesse de dépôt.

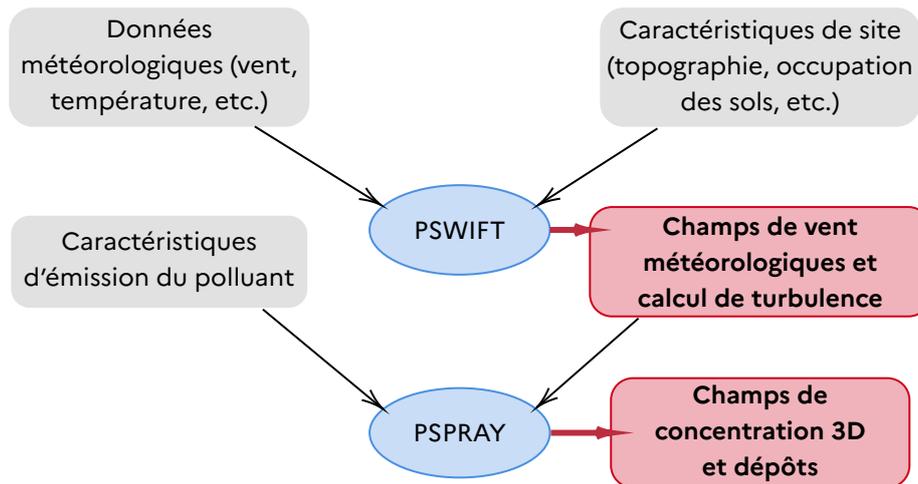


Figure 2.6 – Schéma du modèle PMSS : modèle CFD simplifié constitué d'un modèle météorologique 3D (Swift) et d'un modèle lagrangien à particules (Spray).

## 2.2.1 Ajustement de l'écoulement

Le modèle Swift diagnostique les champs atmosphériques tridimensionnels de vent, de température et de turbulence avec un temps de calcul faible ( $\sim$  quelques minutes) sur un domaine prédéfini.

Il est alimenté dans ces travaux par les champs prévisionnels ou réanalysés du modèle AROME de Météo France (Seity et al., 2011) fournissant des données météorologiques détaillées pour la France. Il s'agit d'un modèle à maille fine (en latitude/longitude) qui calcule les champs météorologiques avec une résolution spatiale de l'ordre de  $0,013^\circ$  ( $\sim 1,3$  km) ou  $0,025^\circ$  ( $\sim 2,5$  km). Le modèle AROME prévoit des champs météorologiques constants et uniformes pour une heure dans chaque maille. Dans ce travail, la résolution AROME de  $0,025^\circ$  est utilisée compte tenu de la disponibilité des données jusqu'à 1000 m d'altitude; par opposition à la résolution de  $0,013^\circ$  uniquement disponible pour les niveaux verticaux 0 m, 2 m, 10 m, 20 m, 50 m et 100 m et ne permettant pas de représenter correctement les phénomènes dans la couche limite de l'atmosphère. AROME génère ses résultats à partir des données réanalysées à 00:00, 03:00, 06:00, 12:00 et 18:00 UTC et sont disponibles à 02:45, 05:45, 11:05, 15:05 et 22:45 UTC, respectivement. En plus des données météorologiques, le modèle Swift est alimenté par des données de topographie de l'IGN (BD TOPO®) et d'occupation des sols CORINE Land Cover (CLC).

Les données d'entrée du modèle Swift sont ajustées à une résolution prédéfinie, de l'ordre de 50 m dans ces travaux. Un module de correction du champ atmosphérique permettant de vérifier la conservation de la masse est inclus dans le modèle Swift (cf. figure 2.7).

L'étape A consiste en un ajustement vertical des données AROME de surface, en particulier pour le vent avec une correction des interpolateurs par rapport au relief et à la rugosité. La méthode de Cressman est utilisée pour interpoler de manière bidimensionnelle et pondérer les données méso-échelle en fonction de la distance au point de maillage du domaine prédéfini dans Swift.

L'étape B est définie lorsque les données de bâti sont prises en compte. L'effet des obstacles sur l'écoulement peut être modélisé en créant des zones spécifiques autour des bâtiments. Dans ces régions, le champ de vitesse est initialisé à l'aide de diverses relations empiriques basées sur les dimensions du bâtiment et le vent incident, selon le principe décrit par

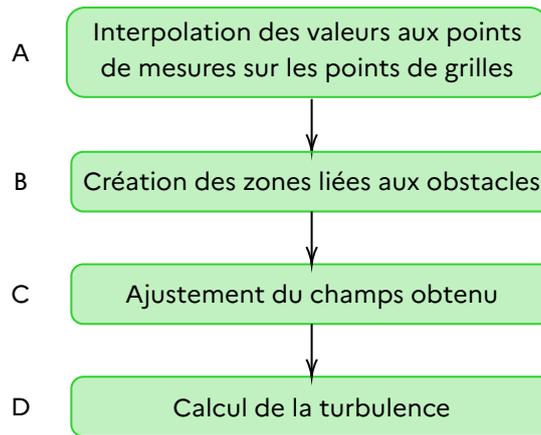


Figure 2.7 – Principe de fonctionnement de Micro Swift en 4 étapes.

Röckle (1990). Les zones spécifiques sont les suivantes :

- **zone de contournement amont** : dans cette zone, le champ de vent contourne l'obstacle;
- **zone de recirculation** : derrière l'obstacle, une zone de recirculation est créée;
- **zone de sillage** : dans cette zone située derrière la zone de recirculation, le vent est modifié pour assurer une transition vers le champ de vent non influencé par l'obstacle. Le vent est nul à la frontière recirculation/sillage et croît dans la zone de sillage jusqu'à atteindre les valeurs du champ non perturbé.

Le rejet de fumée d'incendies étant soumis à la flottabilité, l'influence du bâti se fait principalement et éventuellement au niveau des retombées du panache près du sol. Par conséquent, et en raison du coût de calcul associé élevé, les obstacles (bâtiments) ne sont pas pris en compte dans la suite. Ce sujet est discuté en perspective. La topographie et l'occupation du sol sont en revanche bien modélisées.

Le principe général de l'ajustement du champ, l'étape C, est défini par i) la conservation de la masse ii) être le plus proche possible du champ de vent interpolé iii) tenir compte d'une imperméabilité à travers le sol, les obstacles et le sommet du domaine. Cela s'effectue par la considération d'un multiplicateur de Lagrange  $\lambda$  (Ratto et al., 1994).

$$\mathcal{J}(V, \lambda) = \underbrace{\int_{\Omega} (u - u_0)^2 + (v - v_0)^2 + \frac{1}{S}(w - w_0)^2 \, d\Omega}_{\text{écart entre l'écoulement ajusté et l'écoulement interpolé initial}} + \underbrace{\int_{\Omega} \lambda \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \, d\Omega}_{\text{contrainte d'incompressibilité}} \quad (2.10)$$

Cela revient à minimiser cette fonction en recherchant le couple  $(\lambda, S)$  tel que l'écart (au sens des moindres carrés) entre l'écoulement ajusté et l'écoulement interpolé initial soit minimal et respecte la conservation de la masse, où  $S$  est le coefficient de stabilité atmosphérique. Ce dernier, défini entre 0 et 1, représente les contributions relatives des flux d'air horizontaux et verticaux dans le domaine. Le coefficient  $S$ , défini en fonction du profil vertical de température potentielle et en lien avec les classes de stabilité de Pasquill disponibles en annexe B.1, est décrit par :

- dans un atmosphère stable (classes E et F de Pasquill), le vent tend à contourner les obstacles du terrain horizontalement et le vent vertical est très faible par rapport au vent horizontal.  $S$  tend donc vers 0 pour que la minimisation favorise une modification du vent horizontal en augmentant le coût d'une modification du vent vertical;

- dans un atmosphère instable ou neutre (classes A à D de Pasquill), le vent peut plus facilement passer au-dessus des obstacles et le vent vertical est plus fort. Les modifications du vent horizontal ne sont pas favorisées par rapport aux modifications du vent vertical,  $\mathcal{S}$  tend vers 1 .

Enfin, les paramètres  $u^*$ ,  $L_{MO}$ ,  $h_{CL}$  et  $w^*$  représentatifs de la turbulence sont calculés à l'étape D. Ces paramètres représentent respectivement la vitesse de frottement introduits dans la section 2.1.2, la longueur de Monin-Obukhov (2.6), la hauteur de couche limite et l'échelle de vitesse caractéristique du mélange convectif.

Le paramètre  $w^*$  représente l'échelle de vitesse caractéristique du mélange convectif (courants ascendants et descendants (Bærentsen and Berkowicz, 1984)) qui a lieu les jours marqués par un fort rayonnement solaire. En d'autres termes, il s'agit de la vitesse à laquelle la turbulence due à la flottabilité permet le mélange vertical sur la hauteur de couche limite définie par le paramètre  $h_{CL}$ .

Sur la base de l'albédo, du rapport de Bowen, de  $z_0$  et de paramètres météorologiques définis au niveau du sol et fournis en entrée du modèle Swift, ce dernier construit les champs  $u^*$ ,  $L_{MO}$ ,  $h_{CL}$ ,  $w^*$ . À chaque point de la grille, Swift identifie le régime de stabilité atmosphérique sur la base de la valeur du paramètre  $L_{MO}$ . Dans Swift, il existe plusieurs manières de définir  $u^*$  et  $L_{MO}$ . Dans ces travaux, ces quantités sont décrites par la formule de Louis (1979) dans les cas instables et stables ainsi que Businger et al. (1971) dans le cas neutre.

L'ensemble de ces caractéristiques permet de calculer le profil de turbulence associé à l'approche lagrangienne *via* Spray. Le domaine et la résolution de Swift est utilisé pour la projection des concentrations obtenues par Spray.

## 2.2.2 Dispersion lagrangienne

Le modèle Spray utilise les champs de sortie du modèle Swift et les paramètres descriptifs de la source pour calculer les champs de concentration et de dépôt (Tinarelli et al., 2013; Trini Castelli et al., 2018).

Le modèle Spray propose au moins deux façons de configurer la source. La première est une source de surface horizontale et la seconde est une source en volume. La seconde option peut fournir des émissions sous la forme d'une fonction définie par morceaux, plus lisse verticalement que la première option, qui est une description discrète. Sur la base d'un pas de temps de sauvegarde, le modèle Spray est utilisé pour calculer les champs de concentration en 3D et de dépôt en 2D, projetés sur le domaine prédéfini. La méthode lagrangienne est décrite ci-dessous.

Le modèle de dispersion utilisé dans ces travaux est basé sur une description lagrangienne qui consiste à identifier une particule par sa position dans le domaine de calcul. Elle est basée sur une description par trajectoire du mouvement des particules numériques, en fonction du temps et des forces qui leur sont appliquées.

Comme les modèles gaussiens et eulériens, les modèles lagrangiens résolvent l'équation d'advection-diffusion. La dispersion d'un polluant atmosphérique est simulée en suivant les trajectoires d'un grand nombre de particules numériques, chacune portant une partie de la masse du polluant émis. Les trajectoires sont obtenues en intégrant la vitesse de chaque particule numérique en fonction du temps. Dans les modèles lagrangiens à particules (Rodean, 1996), les positions des particules libérées sont mises à jour à la fois de manière déterministe par le champ de vent moyen et de manière stochastique par une perturbation aléatoire due à la fluctuation turbulente. Il s'agit d'une approche de marche aléatoire décrite par l'équation

de Langevin (Rotach, 2001) avec une taille des particules supposée fixe.

L'une des façons de décrire l'équation du mouvement d'une particule est d'utiliser le schéma de Thompson 87 (Rodean, 1996). Le mouvement d'une particule à la position  $\mathbf{x} = (X, Y, Z)$  est basé sur une forme non linéaire de l'équation de Langevin et défini dans la figure (2.8) comme la somme d'une valeur moyenne et d'une fluctuation.

$$\begin{aligned}
 X(t + \Delta t) &= X(t) + \overline{U}_x(t) \Delta t + U'_x(t) \Delta t \\
 Y(t + \Delta t) &= Y(t) + \overline{U}_y(t) \Delta t + U'_y(t) \Delta t \\
 Z(t + \Delta t) &= Z(t) + \overline{U}_z(t) \Delta t + U'_z(t) \Delta t
 \end{aligned}$$

nouvelle position de la particule
position courante de la particule
mouvement déterministe dû au vent
mouvement turbulent (composante stochastique)

Figure 2.8 – Équation du mouvement d'une particule avec un pas de temps  $\Delta T$ .

Les équations descriptives pour  $U'_i$  sont (2.11a) et (2.11b).

$$U'_i(t + \Delta t) = \left[ 1 - \frac{\Delta t}{T_{L_i}(\mathbf{x}, t)} \right] U'_i(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{U'_i}^2}{\partial x^2} \left( 1 + \frac{U'_i(t)^2}{\sigma_{U'_i}^2} \right) \Delta t + \mu'_i(t) \sigma_{U'_i} \sqrt{2 \frac{\Delta t}{T_{L_i}}}, \quad i = x, y \quad (2.11a)$$

$$U'_i(t + \Delta t) = a(U'_i, \mathbf{x}) + \mu'_i(t) \sigma_{U'_i} \sqrt{2 \frac{\Delta t}{T_{L_i}}}, \quad i = z \quad (2.11b)$$

où :

- $\mu'_i$  est un nombre aléatoire tiré d'une loi de distribution
- le terme  $a$  est déterminé en imposant la condition *well mixed* supposant que les particules se déplacent dans un milieu de manière homogène et que la concentration des particules est uniformément répartie dans le milieu.

Il existe plusieurs manières de définir le profil de turbulence du modèle lagrangien. Le profil utilisé dans ces travaux est celui de Hanna S. R., et al (1982) sans obstacle. Dans la couche limite, i.e. pour  $z < h_{CL}$  avec  $z$  représentant la hauteur courante au-dessus du sol, les profils de turbulence (Hanna S. R., et al, 1982) du modèle Spray sont déterminés comme suit, avec des champs liés à la turbulence calculés par Swift ( $u^*$ ,  $L_{MO}$ ,  $h_{CL}$ ,  $w^*$ ) et avec  $f_z$  le paramètre de Coriolis :

— Conditions stables :

$$\begin{aligned}\sigma_u(z) &= 2.0u_*(1 - z/h_{CL}), & \sigma_v(z) &= 1,3u_*(1 - z/h_{CL}) \\ \sigma_{U_x}(z) &= \sigma_{U_y}(z) = \sqrt{0,5(\sigma_u^2 + \sigma_v^2)} \\ \sigma_w(z) &= 1,3u_*(1 - z/h_{CL}) \\ T_{L_x}(z) &= T_{L_y}(z) = 0,11(h_{CL}/\sigma_{U_x})(z/h_{CL})^{0,5} \\ T_{L_z}(z) &= 0,10(h_{CL}/\sigma_w)(z/h_{CL})^{0,8} \\ Skewness(z) &= 0\end{aligned}$$

— Conditions neutres :  $L_{MO} \leq -300$  et  $L_{MO} \geq 300$

$$\begin{aligned}\sigma_u(z) &= 2.0u^*e^{-3f_z/u^*}, & \sigma_v(z) &= 1,3u^*e^{-2f_z/u^*} \\ \sigma_{U_x}(z) &= \sigma_{U_y}(z) = \sqrt{0,5(\sigma_u^2 + \sigma_v^2)} \\ \sigma_w(z) &= 1,3u^*e^{-2f_z/u^*} \\ T_{L_x}(z) &= T_{L_y}(z) = T_{L_z}(z) = 0,5z/(\sigma_w(1 + 15f_z/u^*)) \\ Skewness(z) &= 0\end{aligned}$$

— Conditions instables :  $-300 < L_{MO} < 0$

$$\begin{aligned}\sigma_{U_x}(z) &= \sigma_{U_y}(z) = u^*(12 - 0,5h_{CL}/L_{MO})^{1/3} \\ \sigma_w(z) &= \begin{cases} 0,763(z/h_{CL})^{0,175} & \text{si } z \leq 0,4h_{CL} \\ 0,722w^*(1 - z/h_{CL})^{0,207} & \text{si } 0,4h_{CL} < z \leq 0,96h_{CL} \\ 0,37w^* & \text{si } 0,96h_{CL} < z \leq h_{CL} \end{cases} \\ T_{L_x}(z) &= T_{L_y}(z) = 0,15h_{CL}/\sigma_{U_x} \\ T_{L_z}(z) &= \begin{cases} 0,1z/(\sigma_w(0,55 + 0,38(z - z_0)/L_{MO})) & \text{si } z \leq 0,1h_{CL} \text{ et } z < z_0 - L_{MO} \\ 0,59z/\sigma_w & \text{si } z \leq 0,1h_{CL} \text{ et } z \geq z_0 - L_{MO} \\ 0,15(h_{CL}/\sigma_w)(1 - e^{-5z/h_{CL}}) & \text{si } z > 0,1h_{CL} \end{cases} \\ Skewness(z) &= w^{*3}(1,4z/h_{CL})e^{-2,5z/h_{CL}}\end{aligned}$$

où

- $\sigma_{U_x}$  et  $\sigma_{U_y}$  sont les variances des vitesses turbulentes horizontales (en  $m \cdot s^{-1}$ );
- $\sigma_w$  est la variance des vitesses verticales (en  $m \cdot s^{-1}$ );
- *Skewness* est l'asymétrie de la distribution des vitesses verticales (en  $m^3 \cdot s^{-3}$ );
- $T_{L_x}$ ,  $T_{L_y}$  et  $T_{L_z}$  sont les échelles de temps lagrangiennes (en s)

Les concentrations sont calculées en utilisant la quantité totale de pollution transportée par toutes les particules numériques dans un certain volume. Pour un flux de polluant  $Q$  en  $kg \cdot h^{-1}$  et  $N_{par}$  particules numériques émises tous les pas de temps  $\Delta t$ , chaque particule transportera  $m_{par} = Q \cdot \Delta t / N_{par}$ . L'augmentation du nombre de particules numériques améliore la précision des résultats, puisque chaque particule porte une masse plus petite. Le temps de calcul dépend linéairement du nombre de particules numériques et du vent moyen. L'augmentation du nombre de particules numériques augmente donc également le temps de calcul.

Cette approche permet de décrire le transport et la diffusion d'un polluant dans l'atmosphère. Outre le transport, des processus de perte liés exclusivement au dépôt du polluant dans un cas non réactif sont impliqués dans l'évolution d'un polluant dans l'atmosphère. En particulier, le dépôt sec associé aux particules est défini ci-dessous. Le lessivage, qui n'a pas été modélisée lors de ce travail en raison de l'absence de pluie lors des incendies d'intérêt, est définie en annexe B.2.

### 2.2.3 Processus de perte

Dans les modèles de dispersion atmosphérique, les processus de perte (dépôt sec ou humide) représentent un flux de polluants vers le sol qui épuise le panache. Il existe deux types de dépôt : les dépôts secs qui représentent la capacité du sol à retenir les polluants et les dépôts humides qui modélisent le lessivage du panache par les gouttes de pluie, introduits dans la phénoménologie de l'écoulement en section 2.1.3. Dans la suite, nous nous intéressons à la modélisation des dépôts secs associés aux particules qui constitue l'unique processus de perte de nos applications.

#### Dépôt sec lagrangien

Dans une approche lagrangienne, les dépôts secs peuvent être diagnostiqués en calculant la probabilité de dépôt de chaque particule numérique près du sol. Certaines approches considèrent cette probabilité de dépôt sur la base de la proposition de Monin (1959). Ce dernier considère une condition de bord (2.12) près de la surface à  $z_{\text{surf}}$  pour l'équation de diffusion verticale en y introduisant un paramètre  $b$  tel que  $b \geq 0$ , avec  $w_s$  correspondant à la vitesse de sédimentation.

$$\left( K(z) \frac{\partial c}{\partial z} + w_s c - bc \right)_{z=z_{\text{surf}}} = 0, \quad (2.12)$$

On supposera ci-après que  $K$ , le coefficient vertical de diffusion, est une constante (exprimée en  $\text{m}^2/\text{s}$ ) pour simplifier le problème. Le sens du paramètre  $b$  est déduit des comportements asymptotiques :

- si  $b = 0$ , la condition sur le flux vertical impose donc un flux nul. Cela implique qu'en  $z = z_{\text{surf}}$  le flux diffusif compense le flux par sédimentation (qui est forcément dirigé vers la surface). Il n'y a pas de transfert de polluant sur la surface, toute la pollution reste dans l'air ;
- si  $b \rightarrow \infty$ , puisque  $K$  et  $w_s$  ne sont pas infinis, cela implique  $c(z_{\text{surf}}) \rightarrow 0$ . Le sol absorbe sans restriction le flux diffusif et le flux de sédimentation qui sont alors les processus impliqués dans la cinétique du transfert vers la surface ;
- donc, si  $0 < b < \infty$ , cela implique que le sol absorbe une certaine proportion du flux qui serait constaté en l'absence de surface. Les processus de captation par la surface, qui influent sur la cinétique du transfert, sont implicitement pris en compte à travers  $b$ . Autrement dit,  $b$  est la vitesse de dépôt totale  $w$  définie par l'équation (2.9) (défini dans la section 2.1.3), incluant ainsi la vitesse de sédimentation et la vitesse de diffusion.

En définissant  $F$  comme le flux de dépôt, qui correspond à la quantité de polluant (en  $\mu\text{g}$ ) déposée par unité de surface (en  $\text{m}^2$ ) et par unité de temps (en s), les conditions sur  $w$  ( $= b$ ) peuvent être schématisées (figure 2.9). De plus,  $c$  est une concentration, donc par définition positive ou nulle. Le terme  $((K/c) \times (\partial c)/(\partial z))$  est défini comme l'opposée de la vitesse diffusive ( $= -w_d$ ) tel que  $w = w_d + w_s$ .

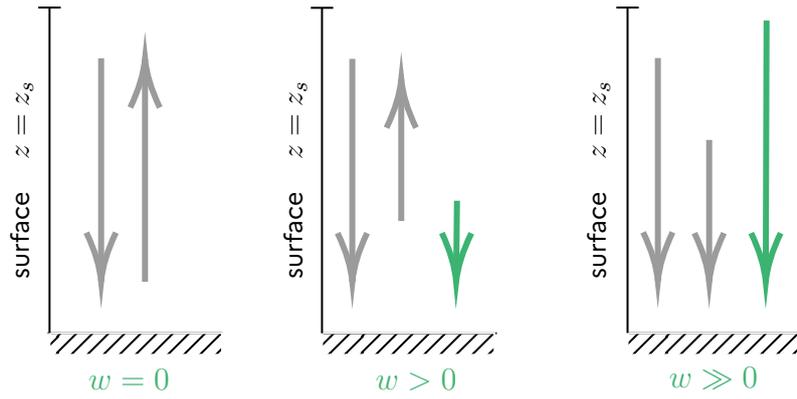


Figure 2.9 – Schématisation des conditions sur  $b$  au niveau de la surface définies par Monin (1959). Pour chaque condition, une flèche grise correspond à la vitesse de sédimentation  $w_s$ , ou à la vitesse de diffusion  $w_d$ , tel que  $w = w_d + w_s$  (flèche verte).

Notons que le cas  $w < 0$  est par définition non défini. En effet, dans la mesure où cette vitesse serait négative, elle conduirait à la production de polluants plutôt qu'à leur perte.

Par la résolution de Monin (1959), la valeur extraite pour calculer le dépôt est  $P(t; h)$ , constituant la probabilité de l'événement "une particule, située à l'altitude  $h$  au temps 0, est absorbée par la surface de la terre dans l'intervalle de temps  $[0; t]$ " (2.13).

$$\begin{aligned}
 P(t; h) &= 1 - \int_0^\infty p(z, t; h) dz \\
 &= \frac{w}{(w - w_s)} \exp\left(\frac{w_s h}{K}\right) \phi\left[-\frac{(h + w_s t)}{\sqrt{2K t}}\right] + \phi\left[-\frac{(h - w_s t)}{\sqrt{2K t}}\right] \\
 &\quad - \frac{2w - w_s}{w - w_s} \exp\left(\frac{wh}{K} + \frac{w(w - w_s) t}{K}\right) \phi\left[-\frac{h + (2w - w_s) t}{\sqrt{2K t}}\right],
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

avec  $\phi$  la distribution de probabilité de la loi normale standard,  $K$  le coefficient de diffusion verticale (en  $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ),  $w_s$  la vitesse de sédimentation (en  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ), et  $w$  la vitesse de dépôt sec (en  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

Le paramètre  $w$  est une donnée d'entrée du modèle lagrangien, le paramètre  $w_s$  étant calculé à l'aide de la formule de Stokes (1.5a). En appliquant cette probabilité, une masse égale à  $m_{\text{dep}} = P(h, \Delta t) \cdot m_{\text{par}}$  est soustraite de la masse portée par la particule numérique et se dépose sur le sol. La masse transportée par la particule numérique est alors  $(1 - P(h, \Delta t)) \cdot m_{\text{par}}$ . La modélisation des dépôts à l'aide de l'approche de Monin (1959) est celle considérée dans ce travail et nécessite la détermination d'une vitesse de dépôt sec.

### Vitesse de dépôt

Nous nous intéressons à présent à la modélisation de la vitesse de dépôt qui est une donnée d'entrée du modèle Spray pour la modélisation du dépôt sous approche lagrangienne. La modélisation de la vitesse de dépôt des espèces polluantes est un phénomène représenté par plusieurs processus physiques tels que la diffusion, la sédimentation, l'impaction, l'interception présentés dans la section 2.1.3.

La modélisation des processus impliqués dans la représentation du dépôt sec, en particulier la sédimentation et la diffusion (figure 2.4), est explicitée ci-après.

La sédimentation d'une particule se produit lorsque les forces de gravité, de flottabilité et de traînée de la particule sont en équilibre (Seigneur, 2018). Pour les particules de faible diamètre, de l'ordre du libre parcours moyen de l'air, c'est-à-dire  $\approx 6,6 \cdot 10^{-8}$  m dans des conditions de température et de pression normales, la loi de Stokes n'est plus applicable et c'est le facteur de Cunningham qui est utilisé. Le calcul de la vitesse de sédimentation  $w_s$  est décrit dans l'équation (2.14).

$$w_s = \frac{g (\rho_p - \rho_\infty) d^2 C_c}{18 \mu_\infty} \quad (2.14)$$

avec :

- $g$  : accélération de la pesanteur ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ )
- $\rho_p$  : masse volumique de la particule ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
- $\rho_\infty$  : masse volumique de l'air ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
- $d$  : diamètre de la particule (m)
- $\mu_\infty$  : viscosité dynamique de l'air ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ )
- $C_c$  : facteur de correction de Cunningham (cf table 2.1 pour les valeurs de référence en fonction du diamètre des particules).

Diamètre de particule ( $\mu\text{m}$ )	Facteur de Cunningham
10	1,01
1	1,16
0,1	2.8
0,01	22

Table 2.1 – Valeurs du facteur de correction de Cunningham en fonction du diamètre de particules (Seigneur, 2018)

Les processus de diffusion d'une particule sont modélisés au travers de la résistance aérodynamique et de la résistance de surface.

— Résistance aérodynamique :

Elle représente les processus de transport vertical par diffusion turbulente dans l'atmosphère. Cette résistance au transfert est élevée dans une atmosphère stable où la dispersion turbulente est faible; elle est faible dans une atmosphère instable où la dispersion turbulente est élevée et peut donc transporter efficacement les polluants vers la surface. Cette résistance peut être exprimée dans les cas neutre, instable ou stable (2.15a), (2.15b) (Businger et al., 1971) en fonction de  $\kappa$  la constante de von Karman, de  $z_{ref}$  la hauteur à laquelle la concentration de polluants est considérée par rapport au sol pour le calcul de la vitesse de dépôt,  $z_0$  la longueur de rugosité,  $L_{MO}$  la longueur de Monin-Obukhov,  $u^*$  la vitesse de frottement et  $\Phi$  la fonction de stabilité intervenant dans le profil de vitesses de vent (équation (2.5)).

$$R_a = \frac{1}{\kappa u^*} \ln(z_{ref}/z_0) \quad \text{cas neutre} \quad (2.15a)$$

$$R_a = \frac{1}{\kappa u^*} (\ln(z_{ref}/z_0) - \Phi(z_{ref}/L_{MO})) \quad \text{cas stable/instable} \quad (2.15b)$$

Ces formulations impliquent des hypothèses et ne s'appliquent que dans la couche de surface, c'est-à-dire la couche la plus basse de l'atmosphère où les flux verticaux de

transfert de chaleur, de quantité de mouvement et de masse sont constants en fonction de l'altitude (entre la surface et  $\sim 10\%$  de la CLA).

— Résistance de surface :

La seconde phase est associée à une résistance de surface (ou résistance de couche quasi-laminaire (Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 2016)). Elle est due à la diffusion dans une couche d'air très mince en contact avec la surface (de l'ordre du millimètre) présentant un régime d'écoulement quasi-laminaire. Par conséquent, cette résistance dépend principalement du coefficient de diffusion brownienne des particules ainsi que des processus d'inertie et d'interception. Cette dernière est exprimée par la relation (2.16).

$$R_s = 1/(\epsilon_0 u^* (E_B + E_{IM} + E_{IN}) f_p) \quad (2.16)$$

Cette relation dépend d'un coefficient empirique  $\epsilon_0$ , de la vitesse de frottement  $u^*$ , d'efficacité de collecte  $E_B$ ,  $E_{IM}$  et  $E_{IN}$  représentant respectivement la diffusion brownienne, l'impaction et l'interception, et enfin d'un terme de correction qui représente la fraction de particules adhérant à la surface après contact  $f_p$ .  $E_B$ ,  $E_{IM}$  et  $E_{IN}$  sont définis dans le modèle de Zhang (2001), avec une correction apportée par (Seigneur, 2018) sur le terme  $E_B$  pour la cohérence avec la diffusion moléculaire et pour être en accord avec les données expérimentales de Moller et Schumann (Möller and Schumann, 1970). Ces termes sont définis par les relations (2.17a), (2.17b), et (2.17c) en fonction de  $Sc$  le nombre de Schmidt qui caractérise l'importance relative de l'advection par rapport à la diffusion (Seigneur, 2018),  $d_p$  le diamètre de la particule,  $d_f$  une dimension caractéristique des éléments de rugosité de la surface et  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  des coefficients empiriques dépendant de la nature de la surface.

$$E_B = Sc^{-2/3}/15 \quad (2.17a)$$

$$E_{IM} = (St/(\alpha + St))^\beta \quad (2.17b)$$

$$E_{IN} = 0,5 (d_p/d_f)^2 \quad (2.17c)$$

Ainsi, la vitesse de diffusion  $w_d$  est généralement exprimée par la relation (2.18) pour les particules en fonction de la stabilité de l'atmosphère.

$$w_d = 1/(R_a + R_s) \quad (2.18)$$

La vitesse de sédimentation  $w_s$  et la vitesse de diffusion  $w_d$  forment, par le biais de l'équation (2.9), la vitesse de dépôt total  $w$ .

## 2.3 Application à l'incendie de Notre-Dame de Paris

La modélisation de la dispersion atmosphérique est appliquée à l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame introduit dans le chapitre 1. Une étude de la situation météorologique est réalisée sur la base de prévisions et de réanalyses pour nous permettre d'obtenir une évaluation de l'erreur commise sur les concentrations lorsque les données réanalysées ne sont pas disponibles, *a fortiori* en situation opérationnelle.

Les émissions sont déterminées en se basant sur les estimations du rapport de l'INERIS INERIS (2019). Nous avons vu dans le chapitre 1 que le terme source se compose d'un débit de polluant et d'une hauteur effective d'émission.

— **Débit :**

Selon le rapport, le polluant concerné par l'émission est le monoxyde de plomb sous forme de particules.

Une représentation de la distribution granulométrique des particules de monoxyde de plomb est considérée avec 4 tailles de particules :  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$ ,  $PM_{d=50}$ , où "d" représente le diamètre de particule.

La quantité de masse émise est considérée unitaire pour chaque espèce et chaque heure d'émission pour ne pas apporter de biais dans la compréhension des résultats obtenus.

— **Hauteur effective :**

La hauteur effective atteinte par le panache est estimée entre 150 m et 450 m. Nous allons considérer dans la suite une source continue sur la verticale entre ces deux valeurs.

Outre l'émission, la vitesse de dépôt sec est une donnée d'entrée du modèle de dispersion. Pour chaque taille de particule et compte tenu de la densité de particule estimée à  $9500 \text{ kg/m}^3$ , les vitesses de sédimentation appliquées sont les suivantes (INERIS, 2019) :

- $PM_{d=1,5}$ ,  $w = 0,017 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
- $PM_{d=15}$ ,  $w = 0,133 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
- $PM_{d=30}$ ,  $w = 0,468 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
- $PM_{d=50}$ ,  $w = 1,15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

La forte dominance de la sédimentation pour les particules de plomb par rapport à la vitesse de diffusion implique que la vitesse de sédimentation peut être considérée comme la vitesse totale de dépôt sec. Ainsi, ces valeurs sont considérées en entrée du modèle PMSS. La résolution spatiale considérée est de  $60 \times 60 \text{ m}^2$  sur un domaine  $15 \times 20 \text{ km}^2$ .

Le jeu de données de prévision utilisé dans ce cas est celui généré à 12:00 UTC par le modèle AROME (Seity et al., 2011) étant donné qu'il s'agit du dernier jeu disponible à l'heure de début de l'incendie (17:00 UTC). La figure 2.10 illustre le profil vertical du vent au niveau de la source issu des réanalyses (à gauche) et les différences relatives entre les données de prévision et réanalyses (à droite) pour quatre heures d'échéance à partir de 17:00 UTC qui est l'heure de début de l'incendie. Nous remarquons que les différences s'accroissent au fur

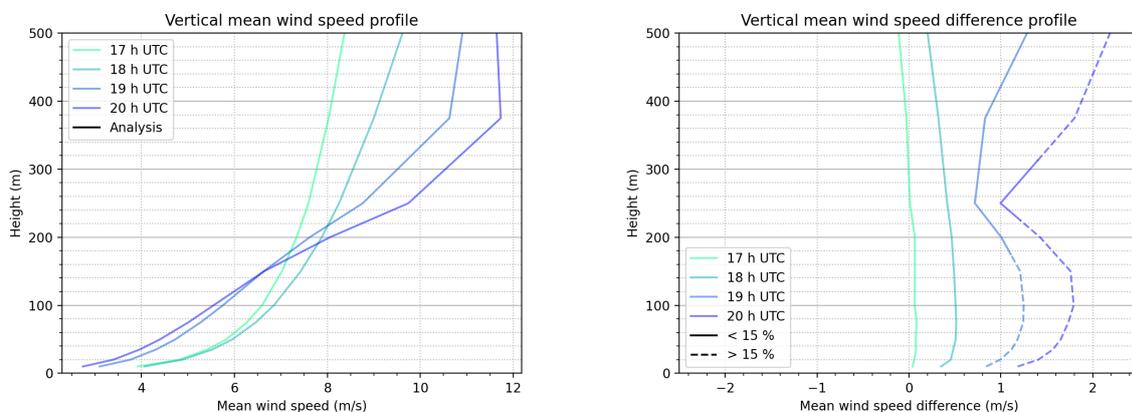


Figure 2.10 – Profil de vent tracé des données météorologiques d'analyses pour les heures de l'incendie (à gauche) et différences prévisions-réanalyses (à droite).

et à mesure que le temps s'écoule et des différences de plus de 15% pour les échéances 19h UTC et 20h UTC. Ceci est dû à la nature chaotique du système météorologique qui induit des divergences dès que la condition initiale est éloignée, l'initialisation météorologique ayant été réalisée à 12 :00 UTC.

Les différences météorologiques sont visibles dans les résultats de modélisation de la dispersion atmosphérique. Notons  $C_{\text{previsions}}$  et  $C_{\text{analyses}}$  les concentrations obtenues à partir des données météorologiques prévisionnelles et réanalysées, respectivement. Les différences des concentration  $C_{\text{analyses}} - C_{\text{previsions}}$  normalisées en fonction des maxima de concentration sont illustrées dans la figure 2.11 tel que :

$$diff = 100 \frac{\max(C_{\text{previsions}}) C_{\text{analyses}} - C_{\text{previsions}} \max(C_{\text{analyses}})}{\max(C_{\text{previsions}}) \max(C_{\text{analyses}})}$$

Les figures 2.11a, 2.11b, 2.11c et 2.11d représentent respectivement les résultats pour  $T_0$ ,  $T_1$ ,  $T_2$  et  $T_3$ .

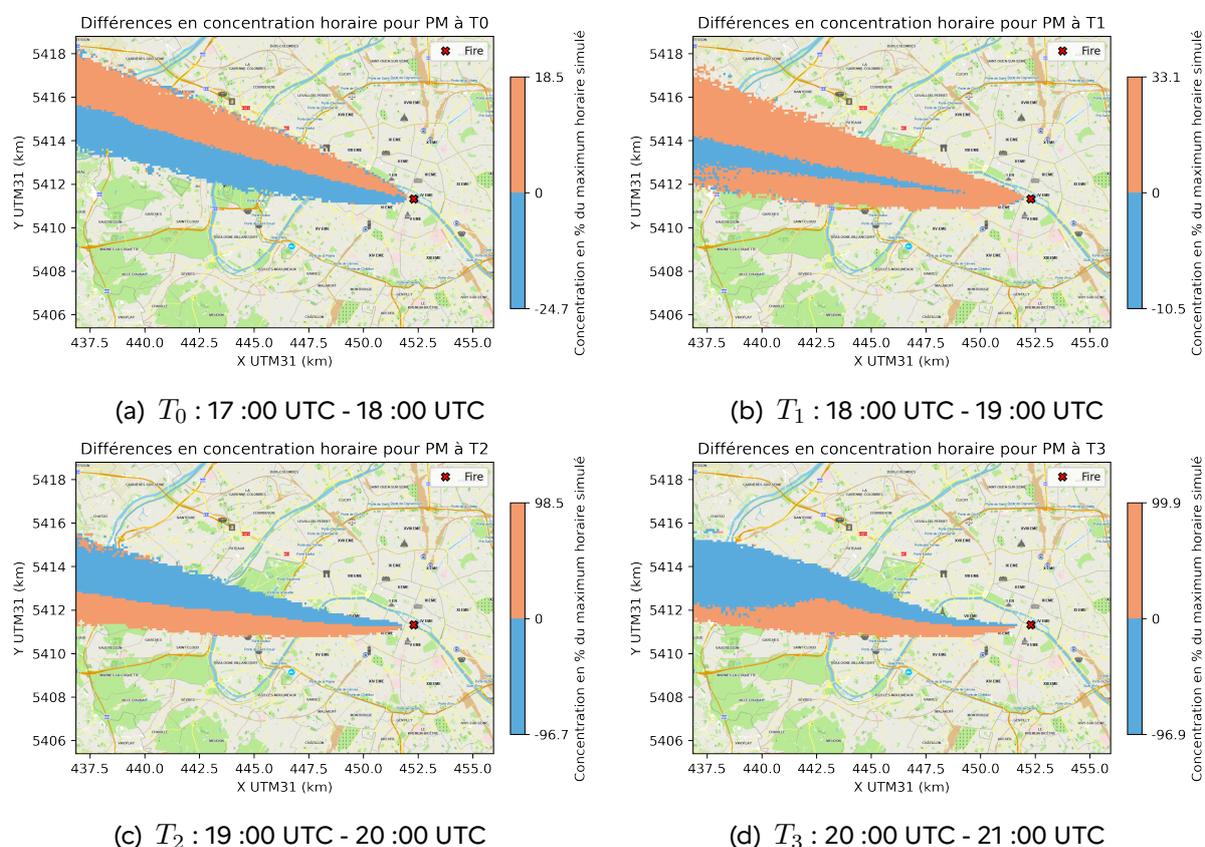


Figure 2.11 – Concentrations obtenues au niveau de la surface entre 17 :00 UTC et 21 :00 UTC et cumulées sur toutes les tailles de particules; différence normalisées  $C_{\text{analyses}} - C_{\text{previsions}}$  obtenue (en pourcentage des maxima des concentration  $C_{\text{analyses}}$  et  $C_{\text{previsions}}$ ).

Dans cette configuration, le maximum  $C_{\text{analyses}}$  et  $C_{\text{previsions}}$  est obtenu à  $T_2$ . Nous remarquons des différences de concentrations jusqu'à 100% pour le temps  $T_2$  et  $T_3$ . Cette différence est due à une différence de vitesse et à un changement de direction du vent, tournant avec l'utilisation des données de prévision, contrairement aux données d'analyses qui indiquent une direction de vent stable (cf. figure 2.10). Les incertitudes liées à l'utilisation des données de prévisions sont ainsi à prendre en compte lors de l'élaboration d'une stratégie de prélèvement, éventuellement avec une stratégie spatiale étendue.

Le cas de l'incendie de Notre-Dame est par la suite utilisé comme cas synthétique pour vérifier l'implémentation des méthodes d'assimilation de données mises en œuvre dans le chapitre 3. Ensuite, l'erreur météorologique qui constitue classiquement une erreur de modèle liée à la dispersion sera exploitée pour tester ces mêmes méthodes.

## Synthèse

La phénoménologie de l'écoulement modélisé dans ces travaux a été introduite pour la modélisation de la dispersion atmosphérique. Pour représenter le mouvement d'un polluant non réactif dans l'atmosphère, les principaux processus sont : le transport horizontal par le vent, le transport vertical par la turbulence et la perte par dépôt.

Ces processus sont modélisés à l'aide d'une approche lagrangienne. Le modèle PMSS est utilisé pour ajuster l'écoulement atmosphérique à une résolution affinée à partir des données du modèle AROME de Météo France et en fonction du relief, puis pour le calcul de la dispersion. En l'absence de pluie, seul le dépôt sec est considéré et dépend de la résistance aérodynamique, de la résistance de surface et d'une vitesse de sédimentation. La vitesse de dépôt sec est une donnée d'entrée du modèle. Une manière de la calculer est d'utiliser le modèle de (Zhang, 2001) et un terme de diffusion brownienne défini par (Seigneur, 2018).

L'incendie de Notre-Dame est considéré pour analyser l'impact de l'utilisation des prévisions météorologiques en situation opérationnelle. Le profil de vitesse de vent a d'abord été étudié et révèle des différences dues à l'aspect chaotique des modèles météorologiques. Ces différences de vitesse de vent ainsi qu'une différence de direction du vent impactent les résultats de concentration au niveau de la surface.

Ce cas test constituera un cas synthétique dans les prochains chapitres afin de vérifier la mise en œuvre des différentes méthodes et l'erreur météorologique générée, qui constitue une erreur classique de modèle de dispersion, sera exploitée pour tester ces méthodes.

## Chapitre 3

# Modélisation inverse d'un terme source

Les méthodes directes permettent d'estimer les conséquences d'un phénomène à partir de sa cause. Le principe de la méthode inverse est au contraire d'estimer la cause d'un phénomène à partir de ses conséquences.

Dans une situation de rejet de fumée lors d'un incendie de grande ampleur, l'estimation de l'émission de polluants est un défi compte tenu du nombre d'incertitudes en jeu (Akagi et al., 2011; Christian, 2003; Invernizzi et al., 2021), *a fortiori* dans un contexte opérationnel. Ce rejet, explicité dans le chapitre 1, est caractérisé par un taux d'émission de polluants associé à une hauteur effective (incluant le phénomène de surhauteur explicité en section 1.3). Or, ces caractéristiques sont *a priori* mal connues : en conséquence, les simulations pour analyser le comportement du panache sont réalisées avec de fortes hypothèses et soumises à d'importantes incertitudes (Dumont Le Brazidec et al., 2021; Winiarek et al., 2012). Compte tenu des incertitudes liées à l'estimation de la source (dynamique temporelle du taux de rejet, hauteur d'émission), si l'on dispose de mesures des concentrations dans l'atmosphère, il devient intéressant d'utiliser une approche de modélisation inverse basée sur l'utilisation conjointe de ces mesures et d'un modèle de dispersion (Dumont Le Brazidec et al., 2020; Johansson et al., 2022; Li et al., 2021; Winiarek et al., 2011). Par assimilation des observations de terrain aux résultats de la modélisation, il est possible d'obtenir une estimation de la source, et par conséquent une estimation de la dispersion des substances toxiques. Cette approche a été largement utilisée à grande échelle (par exemple dans Winiarek et al., 2012; Zidikheri et al., 2018) et, dans une moindre mesure à l'échelle urbaine (par exemple dans Armand et al., 2021; Kovalets et al., 2018; Kumar et al., 2016; Nguyen and Soulhac, 2016; Tilloy et al., 2013) mais peu appliquée à la dispersion d'un panache de fumées en situation de rejet flottant (Hyman and Pavolonis, 2020).

Ce chapitre présente les méthodes de modélisation inverse implémentées et appliquées dans ces travaux à la dispersion atmosphérique de polluants à la suite d'incendies de grande ampleur. Dans un premier temps, le cadre de la modélisation inverse bayésienne, sur lequel s'appuient toutes les méthodes inverses développées, est présenté et les variables et paramètres utilisés toute au long de ce chapitre y sont définis. Ensuite, la méthode du maximum *a posteriori* est présentée dans les cadres inverses variationnels et semi-bayésien, suivie de la méthode de Monte-Carlo par chaînes de Markov (ou MCMC pour "*Markov Chain Monte Carlo*") dans le cadre bayésien. Enfin, une application est présentée pour valider l'implémentation des méthodes inverses et tester ces méthodes pour différentes stratégies de prélèvement.

### 3.1 Cadre de la modélisation inverse

La modélisation inverse par assimilation de données est définie comme l'ensemble des techniques statistiques qui permettent d'améliorer notre connaissance (passée, présente ou future) de l'état d'un système physique à partir de la donnée concomitante d'observations sur le système et de sa connaissance théorique (ou *a priori*).

Dans ces travaux, le cadre de la modélisation inverse est défini bayésien. Le problème inverse peut être exprimé *via* le principe statistique de Bayes (3.1), étant donné  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$  l'ensemble des variables à inverser, notamment celles qui caractérisent le rejet de fumées d'incendie aussi appelé "terme source" dans la suite, et  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$  l'ensemble des observations disponibles :

$$\underbrace{p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}_{\text{a posteriori}} = \frac{\overbrace{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})}^{\text{vraisemblance}} \overbrace{p(\mathbf{x})}^{\text{a priori}}}{\underbrace{p(\mathbf{y})}_{\text{évidence}}}. \quad (3.1)$$

Dans ce cadre bayésien, l'objectif est de reconstruire les distributions *a posteriori* des variables d'intérêt à partir des observations. La vraisemblance évalue la probabilité des observations en fonction d'une source spécifique. La connaissance *a priori* est utilisée pour compenser le nombre limité d'observations disponibles dans la résolution du problème et garantit l'existence et l'unicité de la solution dans le cas où  $N_{\text{obs}} \neq N_{\text{var}}$ . L'évidence correspond à la probabilité des observations. Celle-ci ne dépend pas de  $\mathbf{x}$  et est divisée par elle-même dans les équations de la méthode inverse; il n'est donc pas nécessaire de la définir.

Les principales distributions *a posteriori* à retrouver sont celles qui définissent le terme source de fumées d'incendies. Ce dernier est défini à travers un vecteur noté  $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^{N_{\text{m}}}$  explicité ci-après. L'hypothèse gaussienne est adoptée pour décrire l'*a priori*  $\mathbf{m} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_b, \mathbf{B})$ , équation (3.2a), et la vraisemblance  $\mathbf{y}|\mathbf{m} \sim \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{m}, \mathbf{R})$ , équation (3.2b) :

$$p(\mathbf{m}) = \frac{1}{|\mathbf{B}|^{1/2} (2\pi)^{N_{\text{m}}/2}} e^{-\frac{1}{2} \|\mathbf{m} - \mathbf{m}_b\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2}, \quad (3.2a)$$

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{m}) = \frac{1}{|\mathbf{R}|^{1/2} (2\pi)^{N_{\text{obs}}/2}} e^{-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{m}\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2}, \quad (3.2b)$$

où  $\|\mathbf{A}_1\|_{\mathbf{A}_2}^2 = (\mathbf{A}_1)^T \mathbf{A}_2^{-1} (\mathbf{A}_1)$  correspond au carré de la norme pondérée. Les différentes variables sont définies ci-dessous.

- x** : On désigne par  $\mathbf{x}$  le vecteur dont les composantes sont les variables qui décrivent l'état réel du système. Celui-ci contient l'intégralité des variables d'intérêt à inverser. Il est défini dans l'espace des états  $\mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$ .
- m** : Le terme source caractérisant le rejet de fumées est défini par une masse émise par unité de temps ( $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) et représenté par le vecteur  $\mathbf{m}$ . Par la suite, selon les configurations des inversions mises en œuvre,  $\mathbf{m}$  est tout ou partie de  $\mathbf{x}$ . La source est définie avec des coordonnées horizontales  $(x_s, y_s)$  fixes et pour plusieurs coordonnées verticales  $z_f$  correspondant à des positions possibles de la hauteur d'émission effective. Les hauteurs d'émission pré-sélectionnées qui définissent  $z_f$  peuvent être considérées linéique avec une certaine résolution ou bien ponctuelles sur la verticale (cf. section 2.2). Dans le cadre de la modélisation inverse, nous définissons une impulsion comme un rejet unitaire temporel du terme source. Pour une source  $(x_s, y_s)$  à une hauteur d'émission  $z_f$ , le nombre d'impulsions est égal au nombre de périodes temporelles à reconstruire  $N_t$ . Ainsi, pour  $N_z$  hauteurs d'émission effective  $z_f$ , le total d'impulsion s'évalue

à  $N_m = N_t \times N_z$ . Le débit de rejet est représenté par le vecteur  $\mathbf{m} \in \mathbb{R}^{N_m}$  dans ces travaux.

En l'occurrence, dans les applications présentées par la suite, il s'agit de reconstruire la masse émise par heure d'émission considérée.

$\mathbf{y}, \mathbf{y}_p$  : Le vecteur d'observation est noté  $\mathbf{y}$  et contient les données de prélèvement effectuées sur le terrain. La qualité des résultats de la méthode inverse dépend de la qualité du modèle et de la qualité, du nombre, de la répartition et de la fréquence des observations. Dans ces travaux, ce vecteur représente les résultats de mesures de concentrations dans l'air disponibles à plusieurs localisations dans une période temporelle attenante au sinistre.

Le vecteur de prédictions, noté  $\mathbf{y}_p$ , est le vecteur contenant les concentrations prédites par application du modèle de dispersion avec le vecteur de débits  $\mathbf{m}$ . Les composantes de ces vecteur sont exprimées en  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  pour un nombre total de composantes fixé à  $N_{\text{obs}}$ .

$\mathbf{H}$  : L'opérateur du modèle (aussi appelé opérateur d'observation) qui permet de faire le lien entre le vecteur de débits  $\mathbf{m}$  et les prédictions  $\mathbf{y}_p$  est noté  $\mathbf{H}$  et décrit ci-dessous.

L'opérateur  $\mathbf{H}$  est de taille  $N_{\text{var}} \times N_{\text{obs}}$  et représente le transport d'un terme source  $\mathbf{m}$  donné. Étant donné l'hypothèse d'un polluant inerte,  $\mathbf{H}$  est considéré linéaire. Cet opérateur, aussi appelé matrice de transfert, source-récepteur, *forward*, Jacobienne ou tangent linéaire (3.3) est composé de coefficients, où le coefficient à la ligne  $i$  et à la colonne  $j$  correspond à la prédiction associée à l'observation  $i$  pour un débit de rejet unitaire émis au moment  $j$ . Une modification de cette matrice sera présentée dans le chapitre suivant pour proposer une optimisation du système inverse.

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{1,1} & \cdots & h_{1,j} & \cdots & h_{1,N_{\text{var}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{i,1} & & h_{i,j} & & h_{i,N_{\text{var}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{N_{\text{obs}},1} & \cdots & h_{N_{\text{obs}},j} & \cdots & h_{N_{\text{obs}},N_{\text{var}}} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$\mathbf{R}$  : Il existe des erreurs de mesures  $\mathbf{e}^\mu$  liées aux instruments utilisés et des erreurs de représentativité  $\mathbf{e}^r$ . L'opérateur d'observations comprend non seulement les opérations de transformation et de projection existant dans  $\mathbf{H}$  mais aussi les opérations d'interpolation rendues nécessaires par la perte d'information lors de la projection. Le vecteur de prédictions est donc défini par la relation (3.4) avec l'erreur  $\mathbf{e}^0 = \mathbf{e}^\mu + \mathbf{e}^r$  liée à  $\mathbf{H}$  appelée erreur d'observation

$$\mathbf{y}_p = \mathbf{H}\mathbf{m} + \mathbf{e}^0. \quad (3.4)$$

La matrice  $[\mathbf{R}]_{i,j} = E[[\mathbf{e}^0]_i[\mathbf{e}^0]_j]$  est définie comme la matrice de covariance des erreurs d'observations. Il s'agit d'une matrice symétrique de taille  $\mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$ . On suppose également qu'elle est positive (et donc inversible). Dans ce qui suit, nous supposons que  $\mathbf{R}$  est connue. En pratique, cependant, il est très difficile de l'estimer correctement car la qualité de l'analyse qui en résulte en dépend fortement. On suppose que  $\mathbf{R}$  est diagonale et définie par la relation (3.5) avec  $r \in \mathbf{R}^{+*}$ ,

$$\mathbf{R} = r \mathbf{Id}_{N_{\text{obs}}}, \quad (3.5)$$

ce qui implique que les observations sont toutes indépendantes les unes des autres en décrivant l'erreur avec une seule variable  $r$  (par exemple dans Chow et al., 2008; Dumont Le Brazidec et al., 2021; Winiarek et al., 2012).

De part la complexité des modèles utilisés et des approximations mises en oeuvre pour les obtenir, la modélisation elle-même est entachée d'erreurs et l'opérateur de propagation est imparfait. Il faut donc admettre que l'erreur de représentativité se décompose en réalité en une erreur de représentativité telle que déjà identifiée et une erreur due à la modélisation imparfaite du modèle. Cette dernière source d'erreur est distincte de l'erreur liée à la modélisation de l'observation, bien qu'elle soit de nature similaire. Ainsi, lorsque l'on considère que l'erreur modèle domine dans l'erreur d'observation on parle plutôt d'erreur modèle pour définir  $\mathbf{e}^0$ .

$\mathbf{x}_b$  : Dans le cas où le système est mal contraint, c'est-à-dire qu'il contient plus d'inconnues que d'équations, un terme d'ébauche noté  $\mathbf{x}_b$  est introduit et contient l'ébauche des variables d'intérêt considérées dans  $\mathbf{x}$ . Ce vecteur fournit des informations sur le système et peut être estimé à partir d'une analyse antérieure ou d'une estimation dérivée de principes généraux. Il s'agit de la meilleure estimation de l'état du système en l'absence de toute autre information. Souvent, l'ébauche est définie comme nulle (Dumont Le Brazidec et al., 2021), supposant ainsi qu'il n'y a pas de biais systématique et que l'absence d'incendie est la norme.

L'ébauche associée à  $\mathbf{m}$  est notée  $\mathbf{m}_b$ .

$\mathbf{B}$  : L'erreur associée à l'ébauche est définie comme l'écart de l'estimation *a priori* à la réalité. L'erreur est supposée non biaisée, même si  $\mathbf{x}_b$  a été ajusté pour le permettre. Une matrice de covariance lui est associée, notée  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}}$ . On suppose également qu'elle est symétrique définie positive (et donc inversible). De même que pour la matrice  $\mathbf{R}$ , nous supposons  $\mathbf{B}$  diagonale et définie par la relation (3.6) avec  $b \in \mathbb{R}^{+*}$

$$\mathbf{B} = b \mathbf{Id}_{N_{\text{var}}}. \quad (3.6)$$

Les vecteurs et matrices introduits permettent de constituer mathématiquement notre problème inverse. L'objectif est de trouver l'évolution temporelle du taux de rejet  $\mathbf{m}$  qui permet de simuler, par le modèle de dispersion, les concentrations les plus proches possibles des observations mesurées  $\mathbf{y}$ . Ce problème de minimisation est régularisé à l'aide d'un terme d'ébauche  $\mathbf{m}_b$ . Nous considérerons ainsi dans la suite de ce chapitre que le vecteur contenant les variables d'intérêt est défini par  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}\}$ , avec  $N_{\text{var}} = N_m$ . En outre, le vecteur d'ébauche est défini par  $\mathbf{x}_b = \{\mathbf{m}_b\}$  et est de même dimension que  $\mathbf{x}$ .

Plusieurs types de méthodes sont appliquées pour résoudre le problème inverse. Nous verrons dans un premier temps la description de la méthode du maximum *a posteriori* dans un cadre variationnel et semi-bayésien. Dans un second temps, une méthode de type Monte Carlo par Chaîne de Markov est présentée dans un cadre bayésien.

## 3.2 Méthode du maximum *a posteriori*

La mise en oeuvre d'une méthode inverse déterministe présente un certain nombre d'avantages, notamment en termes de rapidité d'exécution et de simplicité de résolution. La méthode appliquée dans ces travaux est la méthode du maximum *a posteriori* et découle d'une simplification du principe de Bayes avec les hypothèses gaussiennes introduites ci-dessus. Dans le cas de ce type d'hypothèses, la méthode du maximum *a posteriori* équivaut à la méthode des moindres carrés pour un problème linéaire ou linéarisé dont la solution est communément appelée *Best Linear Unbiased Estimator* (BLUE).

### 3.2.1 Cadre variationnel

La méthode inverse du maximum *a posteriori* dans un cadre variationnel consiste en la minimisation d'une fonctionnelle de type moindres carrés. L'obtention de cette fonctionnelle, notée  $\mathcal{J}$  dans la suite, est explicitée ci-dessous :

$$\begin{aligned}\max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) &= \max_{\mathbf{x}} (p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})) \\ &= \max_{\mathbf{x}} \left[ \left( \frac{1}{(2\pi r)^{N_{\text{obs}}/2}} e^{-\frac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^{r-1}}^2} \right) \left( \frac{1}{(2\pi b)^{N_{\text{var}}/2}} e^{-\frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_b\|_{\mathbb{B}^{r-1}}^2} \right) \right].\end{aligned}$$

De plus, pour  $x \in \mathbb{R}_+^*$ ,  $x \mapsto -\log(x)$  est une fonction strictement décroissante sur  $\mathbb{R}_+^*$ . Par composition d'application, on obtient :

$$\begin{aligned}\max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) &= \min_{\mathbf{x}} [-\log(p(\mathbf{x}|\mathbf{y})p(\mathbf{x}))] \\ &= \min_{\mathbf{x}} \left[ -\log \left( \frac{1}{(2\pi r)^{N_{\text{obs}}/2}} e^{-\frac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^{r-1}}^2} \right) - \log \left( \frac{1}{(2\pi b)^{N_{\text{var}}/2}} e^{-\frac{1}{2}(\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_b\|_{\mathbb{B}^{r-1}}^2)} \right) \right] \\ &= \min_{\mathbf{x}} \left( \frac{N_{\text{obs}}}{2} \log(r 2\pi) + \frac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^{r-1}}^2 + \frac{N_{\text{var}}}{2} \log(b 2\pi) + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_b\|_{\mathbb{B}^{r-1}}^2 \right) \\ &= \min_{\mathbf{x}} (\|\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^{r-1}}^2 + \|\mathbf{x}-\mathbf{x}_b\|_{\mathbb{B}^{r-1}}^2) \\ &= \min_{\mathbf{x}} \mathcal{J}(\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Nous sommes donc parvenus à nous situer dans un cadre variationnel qui donne une réponse déterministe au problème de minimisation. Il est à noter que dans le cas où le vecteur d'intérêt  $\mathbf{x}$  est composé par d'autres variables à inverser que  $\mathbf{m}$ , par exemple par  $r$  et/ou  $b$ , les termes de normalisation ne sont pas négligés et la solution est à reconstruire.

#### 3.2.1.1 Équivalence à la méthode des moindres carrés

La résolution du problème inverse consiste donc à minimiser la différence entre les observations et les résultats de simulation et la différence entre l'ébauche et le vecteur de contrôle. Par application de la fonction exponentielle, cela revient à maximiser la distribution *a posteriori*. Cette fonction  $\mathcal{J}$ , définie de  $\mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$  dans  $\mathbb{R}$ , équation (3.7), est dite de "coût" et correspond à la méthode des moindres carrés obtenue lorsque l'on prend en compte un résidu et un terme de régularisation de "Tikhonov". Cette régularisation, définie en fonction du terme ébauche, améliore le conditionnement du problème et permet de garantir l'existence et l'unicité d'une solution.

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\mathbb{R}^{r-1}}^2}_{\text{résidu}} + \underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_b\|_{\mathbb{B}^{r-1}}^2}_{\text{régularisation de Tikhonov}}. \quad (3.7)$$

Minimiser  $\mathcal{J}$  par rapport à  $\mathbf{x}$  revient à rechercher une estimation optimale de  $\mathbf{x}$ , que l'on notera  $\mathbf{x}^*$ , qui résout le problème inverse. Pour trouver  $\mathbf{x}^*$ , on étudie la variation de  $\mathcal{J}$  (3.7)

sous une variation  $\delta \mathbf{x}$  de  $\mathbf{x}$  :

$$\begin{aligned}\delta \mathcal{J}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2} (-\mathbf{H}\delta \mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1} (-\mathbf{H}\delta \mathbf{x}) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{x})^\top \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^\top \mathbf{B}^{-1} (\delta \mathbf{x}) \\ &= -(\delta \mathbf{x})^\top \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + (\delta \mathbf{x})^\top \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b) \\ &= (\delta \mathbf{x})^\top \nabla \mathcal{J}\end{aligned}$$

avec la jacobienne de la fonction de coût définie par (3.8) :

$$\nabla \mathcal{J} = -\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b). \quad (3.8)$$

### Résolution du problème sans contrainte

L'extremum  $\mathbf{x}^*$  qui caractérise la solution est obtenu en résolvant l'équation  $\nabla \mathcal{J} = \mathbf{0}$ . De plus,  $\mathbf{H}$  est linéaire donc  $\mathcal{J}$  est une fonction quadratique de  $\mathbf{x}$ . Enfin, comme  $\mathbf{B}$  est une matrice définie positive, la fonctionnelle est strictement convexe et son extremum correspond donc à un minimum.

$$\begin{aligned}\nabla \mathcal{J}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} &\Leftrightarrow -\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^*) + \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b) = \mathbf{0} \\ &\Leftrightarrow (\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} + \mathbf{B}^{-1}) \mathbf{x}^* - \mathbf{B}^{-1} \mathbf{x}_b = \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \\ &\Leftrightarrow (\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} + \mathbf{B}^{-1}) (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b) + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{x}_b = \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{y} \\ &\Leftrightarrow \mathbf{x}^* = \mathbf{x}_b + (\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} + \mathbf{B}^{-1})^{-1} \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_b).\end{aligned}$$

La matrice  $\mathbf{B}$  est par définition inversible, la matrice  $\mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H}$  est une projection par  $\mathbf{H}$  dans l'espace d'état  $\mathbf{x}$  et est semi-positive donc la somme  $(\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})$  est bien inversible. La matrice  $\mathbf{R}$  est également inversible par définition. Ainsi, la solution de,  $\min_{\mathbf{x}} \mathcal{J}$ , et donc de la méthode *a posteriori*, est bien définie et exprimée par l'estimateur BLUE  $\mathbf{x}^*$  via la relation (3.9) en fonction d'un gain  $\mathbf{K}$  et d'une innovation  $\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_b$ .

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_b + \underbrace{(\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})^{-1} \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1}}_{\mathbf{K} : \text{gain}} \underbrace{(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_b)}_{\text{innovation}} \quad (3.9)$$

Cette formule représente le gain de l'assimilation de données à travers l'espace d'état  $\mathbf{x}$ . Il existe aussi une autre manière d'exprimer le gain à travers l'espace des observations  $\mathbf{y}$ . Suivant la méthode employée pour résoudre le problème, l'une ou l'autre méthode peut être privilégiée. Lorsque l'espace des états est plus grand que l'espace des observations, il est plus coûteux d'inverser  $(\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^\top \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})$  dans la formule de Sherman-Morrison-Woodbury. Dans notre cas, la dimension de l'espace d'état est généralement inférieure à celle de l'espace d'observation, de sorte que l'estimateur est formulé par la relation (3.9) dans l'espace des états.

L'estimateur BLUE est défini sans contrainte. Cela signifie qu'aucune contrainte supplémentaire sur  $\mathbf{x}$  n'est définie. Cependant, cet estimateur contient les taux de rejet temporel, qui sont positifs par nature. Nous devons donc ajouter une contrainte de positivité sur  $\mathbf{x}$  dans la prochaine sous-section, ce qui rend le système inverse non linéaire.

### Résolution du problème sous contrainte de positivité

Plusieurs méthodes d'optimisation, comme les algorithmes de descente et quasi-Newton, peuvent être utilisées pour résoudre un problème inverse non linéaire. La méthode utilisée

dans ces travaux fait partie de cette dernière catégorie d'algorithmes. Elle consiste à approximer la fonction de coût par son développement de Taylor à l'ordre 2, équation (3.10) autour du point courant  $\mathbf{x}$  et à choisir le nouveau point  $\mathbf{x}_k$  comme un minimiseur de ce développement de Taylor.

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \mathcal{J}(\mathbf{x}_k) + \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_k, \nabla \mathcal{J}(\mathbf{x}_k) \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathbf{x} - \mathbf{x}_k, \mathbf{Hess}_k(\mathbf{x}_k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \rangle + o(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^2) \quad (3.10)$$

En particulier, nous utilisons l'algorithme *Limited Memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno Boundary* (L-BFGS-B) pour résoudre le problème sous contrainte de positivité. Il s'agit d'une extension de l'algorithme L-BFGS (Fletcher, 1987) avec l'ajout de bornes de contraintes ("*Boundary*", Byrd et al., 1995). L'algorithme repose sur l'estimation ou l'approximation de la hessienne  $\mathbf{Hess}_k$  (la matrice des dérivées partielles secondes) de la fonction de coût  $\mathcal{J}$  à l'aide d'une matrice qui est mise à jour itérativement au fur et à mesure de la progression de l'algorithme, où le terme  $o(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^2)$  est négligé. L'idée est d'accélérer la convergence tout en évitant le calcul coûteux de la hessienne réelle. Cet algorithme nécessite les données d'entrée suivantes : un état initial  $\mathbf{x}_0$  qui constitue une première approximation de la solution,  $\nabla \mathcal{J}$  (3.8),  $\mathcal{J}$  (3.7), les bornes de contraintes, une première approximation de l'inverse du hessien (symétrique définie positive)  $\mathbf{Hess}_0^{-1}$  qui vaut la matrice identité par défaut, ainsi qu'un paramètre définissant la précision  $\epsilon$  de convergence à obtenir. L'algorithme résout le système inverse de manière itérative à partir de  $k = 0$  avec les étapes suivantes explicitées à l'itération  $k$  :

1. **Calcul de la direction** : La direction de recherche de la solution est calculée par

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{Hess}_k^{-1} \nabla \mathcal{J}(\mathbf{x}_k)$$

2. **Recherche de pas** : l'algorithme recherche un pas de déplacement  $\alpha_k$  par application de la méthode de recherche linéaire (le long de la direction affine définie par  $\mathbf{x}_k$  et  $\mathbf{d}_k$ ), qui respecte les contraintes de frontière et avec  $\alpha_0 = 1$ . Comme il s'agit d'un problème de minimisation, la direction  $\mathbf{d}_k$  est une direction de descente. Le pas  $\alpha_k$  optimal résulte de la minimisation de :

$$\alpha_k = \arg \min \mathcal{J}(\mathbf{x}_k + \alpha \mathbf{d}_k) \quad \text{pour } \alpha > 0.$$

3. **Mise à jour de la solution** : La solution est mise à jour en fonction du pas de déplacement trouvé

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k$$

4. **Incrémentement de l'itération** :  $k = k + 1$

5. **Mise à jour de la matrice BFGS** : La matrice d'approximation de l'inverse de la hessienne est mise à jour :

$$\mathbf{Hess}_k^{-1} = \left( I - \frac{\mathbf{d}_{k-1} \mathbf{y}_{k-1}^\top}{\mathbf{d}_{k-1}^\top \mathbf{y}_{k-1}} \right) \mathbf{Hess}_{k-1}^{-1} \left( I - \frac{\mathbf{d}_{k-1} \mathbf{y}_{k-1}^\top}{\mathbf{d}_{k-1}^\top \mathbf{y}_{k-1}} \right) + \frac{\mathbf{d}_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}^\top}{\mathbf{d}_{k-1}^\top \mathbf{y}_{k-1}}$$

avec  $\mathbf{y}_{k-1} = \nabla \mathcal{J}(\mathbf{x}_k) - \nabla \mathcal{J}(\mathbf{x}_{k-1})$  et  $\mathbf{d}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ .

Une fois la convergence  $\|\nabla f(x_k)\| < \epsilon$  atteinte ou si les contraintes de frontière sont satisfaites, l'algorithme renvoie la solution optimale du problème inverse.

Dans ces travaux, la borne inférieure est supposée égale à 0 et aucune borne supérieure n'est considérée.

### 3.2.2 Cadre semi-bayésien

Les matrices de covariance des erreurs  $\mathbf{R}$  (relation (3.5)) et  $\mathbf{B}$  (relation (3.6)) sont mal connues. Une manière de contourner leur initialisation est d'introduire un poids  $\lambda$  attaché à *a priori*.

#### Ajustement du problème inverse

La relation (3.7) peut être réécrite avec  $\lambda \in \mathbb{R}_+^*$  ( $\lambda^2 = r/b$ ) permettant d'attribuer plus ou moins de poids au terme de régularisation sans introduire explicitement les matrices de covariance  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{B}$  :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\lambda^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^\top(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b), \quad (3.11)$$

et le gradient qui accompagne cette fonction de coût peut se réécrire en fonction de  $\lambda \in \mathbb{R}$  (3.8) :

$$\nabla \mathcal{J} = -\mathbf{H}^\top(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \lambda^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b). \quad (3.12)$$

Dans le cas de la régularisation de Tikhonov, le problème de minimisation (3.11) peut se réécrire (3.13), avec  $\mathbf{x}_\lambda^*$  la solution du système en fonction de  $\lambda$  (Hansen, 2010) :

$$\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x}} \{ \|\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 + \lambda^2 \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_b\|^2 \} = \min_{\mathbf{x}} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ \lambda \mathbf{I}_V \end{pmatrix} \mathbf{x} - \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \lambda \mathbf{x}_b \end{pmatrix} \right\|^2 \quad (3.13)$$

avec  $\mathbf{I}_V$  la matrice identité de taille  $N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}$  ou encore (3.14) :

$$(\mathbf{H}^\top \mathbf{H} + \lambda^2 \mathbf{I}_V) \mathbf{x} = \lambda^2 \mathbf{I}_V \mathbf{x}_b + \mathbf{H}^\top \mathbf{y} \quad (3.14)$$

En suivant cette formulation, l'estimateur BLUE (3.9) est réécrit comme (3.15) dans l'espace des états (qui définit  $\mathbf{x}$ ) et constitue la solution de notre problème sans contrainte de positivité  $\mathbf{x}_\lambda^*$  :

$$\mathbf{x}_\lambda^* = \mathbf{x}_b + \underbrace{(\lambda^2 \mathbf{Id}_{N_{\text{var}}} + \mathbf{H}^\top \mathbf{H})^{-1}}_{\mathbf{K}_\lambda : \text{gain}} \underbrace{\mathbf{H}^\top (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_b)}_{\text{innovation}}. \quad (3.15)$$

Les nouvelles définitions de  $\mathcal{J}$  (3.11) et de  $\nabla \mathcal{J}$  (3.12) constituent les données d'entrée de l'algorithme L-BFGS-B en fonction de la variable  $\lambda$ .

La variable  $\lambda$  permet d'attribuer plus ou moins de poids au terme de régularisation de Tikhonov introduit précédemment (cf relation (3.7)). Le poids  $\lambda$  peut être vu comme une estimation initiale de l'erreur modèle associée à la résolution du problème inverse. Plus cette valeur est élevée, plus le solveur fait porter le poids de la minimisation sur le terme de régularisation. Cela signifie que les observations ne fournissent pas suffisamment d'information à notre système et/ou que l'erreur d'observation et/ou de modèle est importante. Le résultat de l'inversion dépend fortement de la valeur attribuée à  $\lambda$ , or celle-ci, définie en fonction des matrices  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{B}$ , est difficile à fixer *a priori*.

Nous nous intéressons par la suite à deux méthodes itératives d'estimation d'un  $\lambda$  optimal : la méthode de la *L-curve* et la méthode de validation généralisée croisée (GCV). Le principe de ces deux méthodes repose sur l'échantillonnage de  $\lambda$  parmi un intervalle  $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ . La borne inférieure  $\lambda_{\min}$  est définie égale à la valeur singulière minimale de  $\mathbf{H}$  et la borne supérieure de  $\lambda_{\max}$  est définie égale à la valeur singulière maximale de  $\mathbf{H}$ . Le choix de ces bornes permet d'effectuer une exploration de  $\lambda$  de manière à 1- éviter l'*overfitting* avec les observations étant donné que la plus petite valeur singulière de  $\mathbf{H}$  permet de décrire la stabilité numérique du problème inverse et 2- éviter une sous estimation des caractéristiques du problème ( $\lambda_{\max}$ ). Les méthodes sont détaillées ci-après.

## Méthode de la L-curve

La *L-curve* est une méthode d'estimation par échantillonnage de la variable  $\lambda$  pour un système linéaire. Il s'agit d'une méthode à deux dimensions, paramétrique en  $\lambda$ . L'objectif est de trouver le  $\lambda$  situé sur la courbe définie par (3.16) permettant d'obtenir le compromis optimal entre le résidu et le terme de régularisation de la fonction de coût (3.11).

$$(C) : \begin{cases} \rho(\lambda) = \ln \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_\lambda^*\|_2 \\ \xi(\lambda) = \ln \|\mathbf{x}_\lambda^* - \mathbf{x}_b\|_2 \end{cases} \quad (3.16)$$

La figure 3.1 illustre un tracé de L-curve suivant les axes  $\ln \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_\lambda^*\|_2$  et  $\ln \|\mathbf{x}_\lambda^* - \mathbf{x}_b\|_2$ . Le meilleur

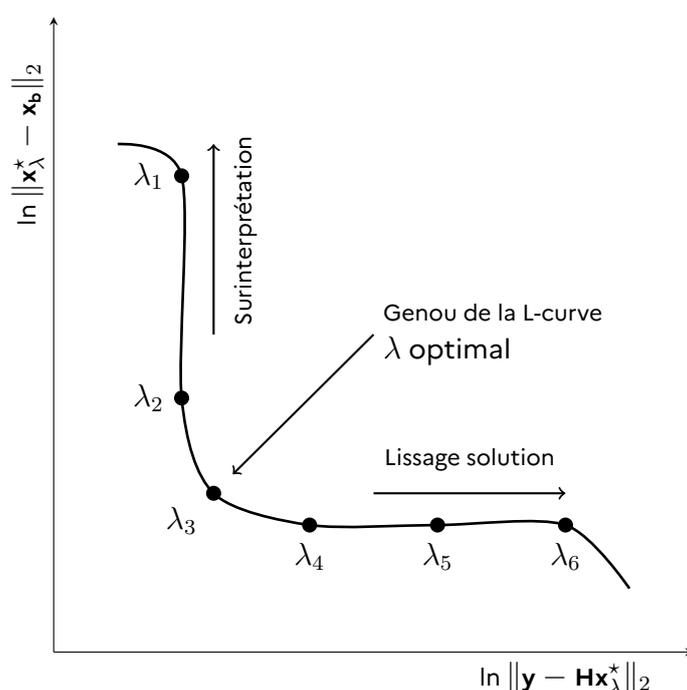


Figure 3.1 – Représentation de la méthode L-curve pour une régularisation de Tikhonov standard. L'abscisse mesure l'écart par rapport aux observations et l'ordonnée l'écart par rapport à l'ébauche. Adapté de (Hansen, 2010).

compromis de  $\lambda$  se retrouve au niveau du point le plus proche de l'origine du repère, soit, au niveau du "genou" de la courbe. Dans le cas où  $\lambda$  donne trop d'importance à  $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}_\lambda^*\|_2$  par rapport à  $\|\mathbf{x}_\lambda^* - \mathbf{x}_b\|_2$ , alors la solution apparaît "lissée" et dans le cas contraire il y a surinterprétation de la solution.

Pour obtenir le  $\lambda$  optimal, la méthode consiste à calculer la courbure de la courbe (3.16) et de rechercher le maximum de courbure. Le rayon de courbure d'un tracé indique son niveau d'incurvation : plus le rayon de courbure est élevé, plus le tracé se rapproche d'une ligne droite, et inversement. Mathématiquement, le rayon de courbure est la valeur absolue du rayon du cercle tangent à la courbe au point recherché, cercle qui "épouse cette courbe le mieux possible". Une manière de définir cette courbure est de considérer la formule de géométrie classique (Hansen, 2010). La décomposition en valeurs singulières (SVD) de la solution  $\mathbf{x}^*$  est utilisée et l'algorithme décrit par Cultrera and Callegaro (2020) est appliqué pour retrouver le maximum de courbure.

Le  $\lambda$  optimal peut ainsi être retrouvé en l'échantillonnant parmi l'intervalle  $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$  via le calcul du maximum de courbure.

## Méthode de validation croisée généralisée (GCV)

La méthode de la validation croisée généralisée ou *Generalized Cross Validation (GCV)* est une méthode d'estimation par échantillonnage de la variable  $\lambda$  applicable dans le cas où le système est linéaire ou non (Wahba et al., 1995). Le principe de la GCV est basé sur une approche statistique. L'objectif est de choisir une valeur de régularisation  $\lambda$  qui rend les données d'observations  $\mathbf{y}$  cohérentes. Cette méthode a pour but de trouver  $\lambda$  pour lequel la prédiction des données manquantes de  $\mathbf{y}$  est optimale.

L'idée est de retirer une observation du vecteur  $\mathbf{y}$ , laissant  $\mathbf{y}_i \in \mathbf{R}^{m-1}$  et de prédire la valeur retirée en utilisant  $\mathbf{y}_i$ . La relation qui définit l'estimateur dans l'espace des états (3.15) est ainsi redéfinie par (3.17), où  $\mathbf{H}_i$  est l'opérateur  $\mathbf{H}$  sans la ligne  $i$ .

$$\mathbf{x}_{i\lambda}^* = \mathbf{x}_b + \underbrace{(\lambda^2 \mathbf{Id}_{N_{\text{var}}} + \mathbf{H}_i^T \mathbf{H}_i)^{-1} \mathbf{H}_i^T}_{\text{gain } \mathbf{K}_{\lambda,i}} (\mathbf{y}_i - \mathbf{H}_i \mathbf{x}_b). \quad (3.17)$$

Ensuite, on souhaite obtenir le  $\lambda$  pour lequel l'erreur de prédiction est minimale. Pour cela, on calcule cette erreur qui se définit par la relation (3.18).

$$e_p(\lambda) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\mathbf{H}_i \mathbf{x}_{i\lambda}^* - \mathbf{y}_i)^2. \quad (3.18)$$

De plus, un résultat algébrique connu sous le nom de *leave-one-out lemma* fait évoluer (3.18) en (3.19) pour faire apparaître la solution  $\mathbf{x}_{\lambda}^*$  plutôt que les  $N_{\text{obs}}$  solutions  $\mathbf{x}_{i\lambda}^*$ , et avec le gain défini par  $\mathbf{K}_{\lambda,i}$ .

$$e_p(\lambda) \approx \frac{1}{N_{\text{obs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \left( \frac{\mathbf{H}_i \mathbf{x}_{\lambda}^* - \mathbf{y}_i}{1 - \mathbf{H}_i \mathbf{K}_{\lambda,i}} \right)^2 \quad (3.19)$$

Ensuite, la méthode de validation croisée généralisée suppose que la valeur moyenne  $N_{\text{obs}}^{-1} \text{Tr}(\mathbf{H} \mathbf{K}_{\lambda})$  donne une estimation acceptable de l'opération complexe  $\mathbf{H}_i \mathbf{K}_i$ , en particulier lorsque les données sont suffisamment, avec  $\mathbf{K}_{\lambda}$  défini dans (3.15). Ainsi, la formulation des erreurs de prédictions peut à nouveau se reformuler en (3.20).

$$e_p(\lambda) \approx \frac{1}{N_{\text{obs}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{obs}}} \left( \frac{\mathbf{H}_i \mathbf{x}_{\lambda}^* - \mathbf{y}_i}{1 - N_{\text{obs}}^{-1} \text{Tr}(\mathbf{H} \mathbf{K}_{\lambda})} \right)^2. \quad (3.20)$$

Enfin, par application de la décomposition SVD, la fonctionnelle suivante (3.21) est obtenue

$$\mathcal{G}(\lambda) = \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}(\lambda)\|_2^2}{\left(N_{\text{obs}} - \sum_{i=1}^{N_{\text{var}}} f_i(\lambda)\right)^2}, \quad (3.21)$$

avec  $\text{Tr}(\mathbf{H} \mathbf{K}_{\lambda}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{var}}} f_i(\lambda)$ , et  $f_i$  les coefficients du filtre de Tikhonov obtenus par décomposition SVD (Hansen, 2010).

La méthode consiste à échantillonner  $\lambda$  parmi un intervalle  $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$  dans l'objectif de minimiser la fonctionnelle  $\mathcal{G}$  qui définit l'erreur de prédiction (relation (3.21)).

La combinaison de la méthode déterministe du maximum *a posteriori* pour la résolution de  $\mathbf{x}$  et d'une méthode d'échantillonnage pour retrouver le  $\lambda$  optimal nous situe dans un cadre semi-bayésien.

### 3.3 Méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov

Il existe des méthodes bayésiennes capables de déterminer non seulement le maximum de la probabilité *a posteriori* de la formule de Bayes mais également le reste de la distribution. Cela s'effectue sous les mêmes conditions évoquées dans la section 3.1 par échantillonnage de la distribution *a posteriori*. Le choix de la méthode de Monte Carlo par Chaîne de Markov donne une réponse objective bayésienne qui constitue une réponse rigoureuse au problème inverse avec aussi peu d'*a priori* possible.

#### 3.3.1 Description de la méthode

Les méthodes de Monte Carlo sont une famille de méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des techniques probabilistes (des procédés aléatoires).

L'objectif est d'atteindre une petite région présentant une probabilité significative définie dans un espace de grande dimension sans avoir beaucoup d'idée de son emplacement potentiel. Dans ce cas de figure, les méthodes de Monte Carlo qui peuvent fonctionner sur des espaces de grande dimension sont loin d'être triviales (Tarantola, 2005). En effet, l'échantillonnage de Monte Carlo d'une distribution de probabilité dans un espace à grande dimension pose deux problèmes. Le premier est de localiser la ou les régions de probabilité significative et le second d'échantillonner l'ensemble de la ou des régions de manière suffisamment dense. La découverte de l'emplacement de la région est le problème le plus difficile et les mathématiques seules ne peuvent le résoudre (en raison du grand vide des espaces de grande dimension). Si l'on a réussi à s'approcher de l'une de ces régions, la technique décrite dans la section suivante permet d'effectuer une marche aléatoire, une sorte de mouvement Brownien efficace pour explorer la région et éviter d'en sortir.

Dans la suite nous nous intéressons à une méthode de Monte Carlo par Chaîne de Markov. Il s'agit d'une méthode aléatoire qui n'a pas de mémoire : chaque étape algorithmique ne dépend que de l'étape précédente. Les variables à reconstruire, ou "variables d'intérêt" sont dans un premier temps définies puis initialisées. Ensuite, la méthode échantillonne l'espace des possibles pour permettre de reconstituer la distribution *a posteriori* à l'aide d'hypothèses sur l'*a priori* et la vraisemblance. À chaque étape de l'échantillonnage, une probabilité est attribuée à la configuration actuelle des variables d'intérêt pour traduire à quel point celle-ci permettent de bien reconstruire les observations *via* le modèle ou non. En fonction des probabilités obtenues, la chaîne de Markov est guidée et les variables d'intérêt modifiées dans la zone où la probabilité est la plus forte. Les variables d'intérêt sont dans notre cas constituées du débit de rejet et notre souhait est d'approcher au mieux ces paramètres compte tenu du problème inverse dimensionné.

Le but n'est pas uniquement de retrouver les paramètres pour lesquels la solution est optimale mais de reconstruire l'ensemble des possibles avec les probabilités associées. Résoudre un problème par la méthode MCMC consiste à reconstruire la distribution de la probabilité cible : la distribution *a posteriori* définie par la formule de Bayes. La technique algorithmique utilisée dans ces travaux est détaillée ci-après.

#### 3.3.2 Algorithme de Metropolis-Hastings

La méthode MCMC implémentée pour ces travaux est basée sur l'algorithme de Metropolis-Hastings (Hastings, 1970) dans l'objectif d'échantillonner la distribution postérieure  $P_y : \mathbf{x} \rightarrow$

$p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ . L'algorithme de Metropolis-Hastings est conçu pour explorer efficacement l'espace d'échantillonnage en utilisant une approche stochastique.

Les étapes de cet algorithme sont décrites ci-dessous à partir d'un taux d'acceptation classique  $\alpha_a$  (Dumont Le Brazidec et al., 2021) (3.22)

$$\alpha_a(\mathbf{x}_{\text{new}}|\mathbf{x}_{\text{old}}) = \min \left( 1, \frac{g(\mathbf{x}_{\text{old}}|\mathbf{x}_{\text{new}}) p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_{\text{new}}) p(\mathbf{x}_{\text{new}})}{g(\mathbf{x}_{\text{new}}|\mathbf{x}_{\text{old}}) p(\mathbf{y}|\mathbf{x}_{\text{old}}) p(\mathbf{x}_{\text{old}})} \right) \quad (3.22)$$

qui découle du principe de la balance détaillée (3.23)

$$P_y(\mathbf{x}_{\text{new}}|\mathbf{x}_{\text{old}}) P_y(\mathbf{x}_{\text{old}}) = P_y(\mathbf{x}_{\text{old}}|\mathbf{x}_{\text{new}}) P_y(\mathbf{x}_{\text{new}}). \quad (3.23)$$

où  $\mathbf{x}_{\text{new}}$  est un état généré à partir d'un état antérieur  $\mathbf{x}_{\text{old}}$  et d'une fonction de transition  $g$ . Une distribution symétrique est utilisée pour définir la probabilité  $g$ , ce qui permet de simplifier les équations. La distribution normale repliée (3.24),

$$g(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \left[ \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(-\frac{(x+\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \right] \mathbf{1}_{\{x \geq 0\}}, \quad (3.24)$$

(Chakraborty and Chatterjee, 2013) avec  $\mu$  la moyenne de la distribution et  $\sigma^2$  la variance de la loi normale associée, est adoptée pour toutes les variables d'intérêt contenues dans  $\mathbf{x}$ , sauf indication contraire, afin de garantir la positivité des variables échantillonnées.

À partir d'un état initial  $\mathbf{x}_{\text{init}}$  fixé et des paramètres de la fonction de transition  $g$  choisis tels que le taux d'acceptation se situe entre 0,1 et 0,5, les étapes de l'algorithme de Metropolis-Hastings (Hastings, 1970) sont les suivantes pour un nombre prédéfini,  $N_{\text{iter}}$ , d'itérations :

1. **Générer un nouvel état à partir de l'ancien** : Engendrer aléatoirement  $\mathbf{x}_{\text{new}}$  à partir de  $\mathbf{x}_{\text{old}}$  en fonction de la probabilité de transition  $g$ ;
2. **Calcul du taux d'acceptation** : Calcul de  $\alpha_a$  qui indique à quel point le nouvel état est probable étant donné l'état actuel, et selon la distribution cible  $P_y$  (basé sur le principe de la balance détaillée);
3. **Acceptation ou rejet du nouvel état** : Une composante aléatoire  $u$  est utilisée pour créer un mécanisme stochastique permettant de garantir que la chaîne de Markov générée par l'algorithme converge vers la distribution de probabilité souhaitée.
  - Engendrer  $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ ;
  - Si  $u > \alpha_a$ , accepter  $\mathbf{x}_{\text{new}}$  et  $\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{new}}$ ;
  - Si  $u \leq \alpha_a$ , rejeter  $\mathbf{x}_{\text{new}}$  et  $\mathbf{x}_{\text{old}} \leftarrow \mathbf{x}_{\text{old}}$ .

Le principe d'échantillonnage par la méthode MCMC est décrit dans la figure 3.2. L'algorithme s'arrête une fois parcouru le nombre prédéfini d'itérations. La chaîne de Markov résultante est constituée de tous les états acceptés et permet d'estimer la distribution cible  $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  (3.1) via un très grand nombre d'échantillons.

L'ergodicité du processus MCMC garantit l'unicité et le principe balance détaillé assure l'existence de la solution. La solution trouvée consiste en tous les échantillons d'état acceptés du système, ce qui donne une estimation de Monte Carlo des distributions postérieures. En pratique, seul un nombre fini d'itérations MCMC peut être simulé, de sorte que le choix de la condition initiale peut influencer la qualité de la convergence. Il est donc nécessaire d'ignorer les premières itérations de l'algorithme. La méthode la plus fréquemment utilisée consiste

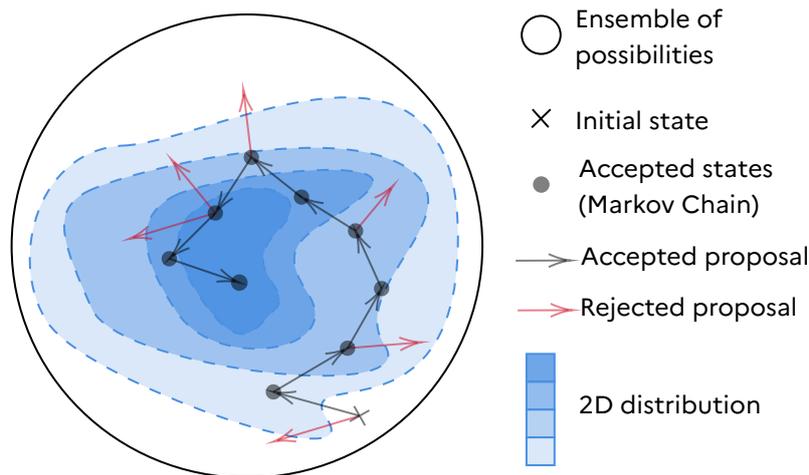


Figure 3.2 – Échantillonnage d’une distribution à deux variables par le principe MCMC : pour un nombre donné d’itérations, un nouvel état est proposé au système à partir d’un état précédent, selon une probabilité de transition. Ce nouvel état est soit accepté, soit rejeté. S’il est accepté, le nouvel état remplace l’ancien, sinon un nouvel état est proposé à nouveau à partir de l’ancien.

à écarter (ou “burn-in”) les premières itérations avant la convergence qui peut être évaluée à l’aide de divers diagnostics (Cowles and Carlin, 1996 ; Riabiz et al., 2022). L’approche consistant à effectuer une nouvelle inversion en utilisant les valeurs de convergence de la première inversion, par exemple en utilisant les dernières valeurs obtenues du système, est appliquée par la suite afin d’effectuer un burn-in. Pour limiter le temps de calcul tout en s’assurant que la chaîne de Markov est proche de son régime asymptotique, le nombre d’itérations utilisé est de 2 à  $2,5 \times 10^6$ , sur la base de tests effectués au préalable.

### 3.4 Application à l’incendie de Notre Dame de Paris

L’incendie de la cathédrale de Notre-Dame décrit dans les chapitres précédents (1.4 et 2.3) est utilisé comme cas d’application de ce chapitre. Des observations fictives sont générées à partir du rejet formulé dans le rapport de l’INERIS (INERIS, 2019) dans l’objectif de valider l’implémentation des méthodes inverses présentées dans ce chapitre. Par ailleurs, les différences météorologiques observées dans l’application du chapitre 2 sont exploitées pour générer de l’erreur modèle et nous permettre de tester les méthodes inverses. De plus, trois stratégies de prélèvement sont considérées dans un contexte opérationnel. À chaque test, les stratégies sont comparées pour tirer profit d’un enseignement sur la disposition spatiale et temporelle d’observations requise par les méthodes inverses.

#### 3.4.1 Génération de données synthétiques

En raison du manque de mesures pendant l’incendie, des observations synthétiques sont générées correspondant à une situation opérationnelle de déploiement de deux équipes sur site. Trois stratégies différentes sont présentées. La stratégie A est définie avec une couverture temporelle de quatre heures depuis le début de l’incendie et pour huit localisations. La stratégie de prélèvement est répartie sur les deux équipes de la manière suivante : la première couvre le périmètre de 0 à 6 km depuis la source dans la direction du vent et la deuxième

couvre un champ plus lointain de 6 à 12 km (figure 3.3). Le deuxième scénario, B (figure 3.4), est une réduction temporelle de la stratégie A, pour prendre en considération un délai d'une heure pour le déclenchement et le déplacement sur les lieux des équipes de prélèvement. Enfin, une stratégie C (figure 3.5) est définie comme une réduction spatiale de la stratégie B sans prélèvement en champ lointain.

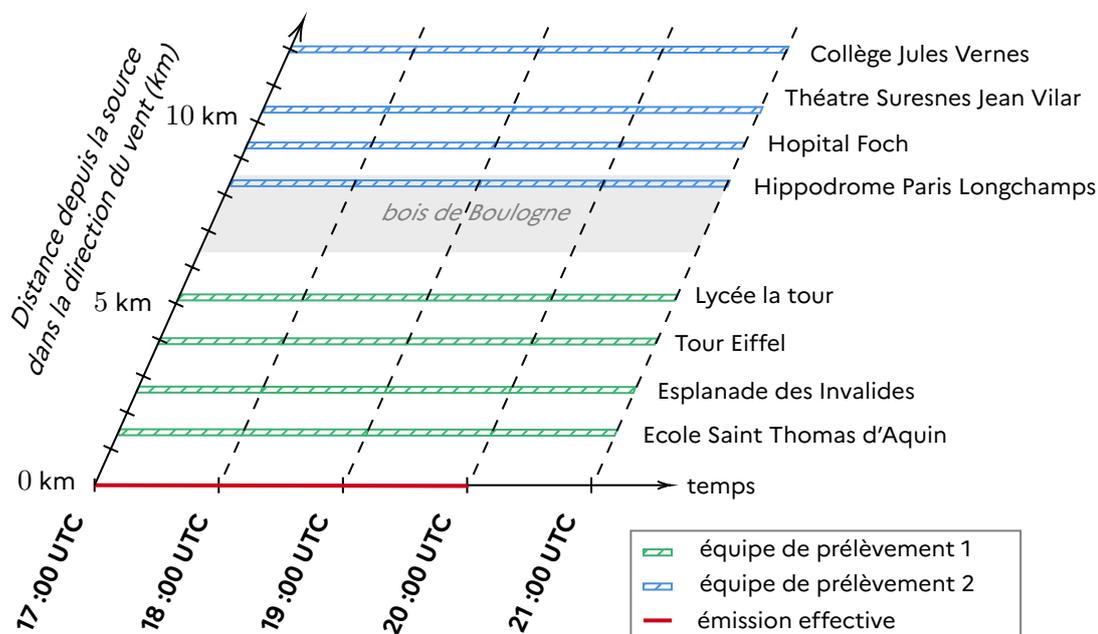


Figure 3.3 – Stratégie de prélèvement A : couverture temporelle complète et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0–6 km, 2 : couverture 6–12 km dans la direction du vent depuis la source.

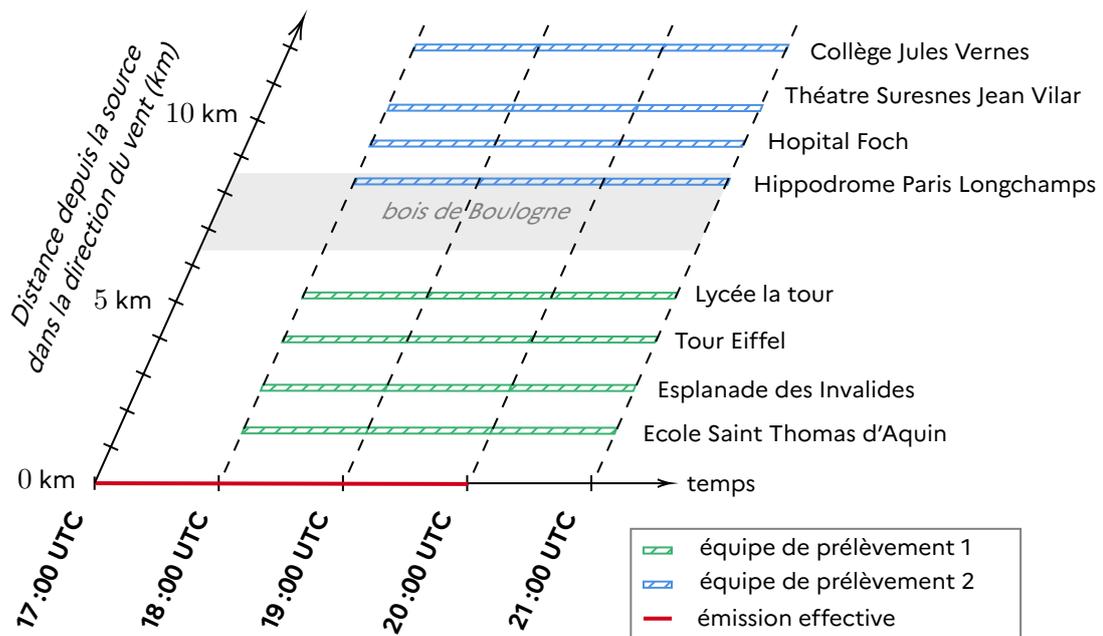


Figure 3.4 – Stratégie de prélèvement B : réduction temporelle du scénario A. Couverture temporelle en tenant compte du temps d’intervention et de déclenchement (~ 1h) et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0 – 6 km, 2 : couverture 6 – 12 km dans la direction du vent depuis la source.

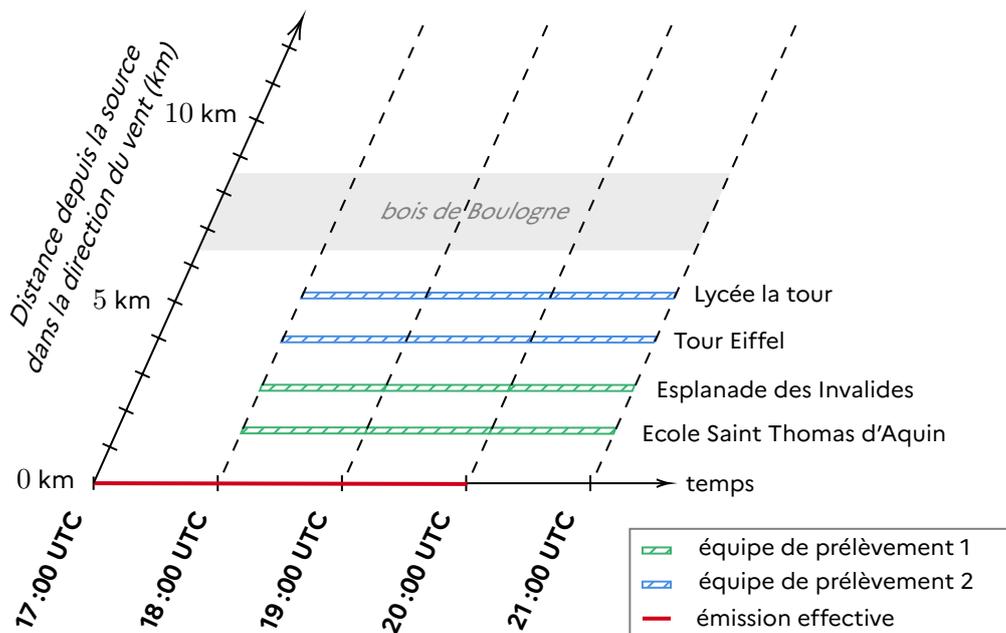


Figure 3.5 – Stratégie de prélèvement C : réduction spatiale du scénario B. Couverture temporelle en tenant compte du temps d’intervention et de déclenchement ( $\sim 1$ h) et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0 – 3 km, 2 : couverture 0 – 6 km dans la direction du vent depuis la source.

Les observations sont extraites des résultats de simulation de dispersion atmosphérique des fumées d’incendie pour les trois stratégies de prélèvement. Nous avons vu dans le chapitre 1 que le terme source se compose d’un débit de polluant et d’une hauteur effective d’émission. Ces caractéristiques sont définies à partir des émissions estimées de l’INERIS (INERIS, 2019).

— **Débit :**

Selon ce rapport, le polluant concerné par l’émission est le monoxyde de plomb sous forme de particules. Le taux de production de particules est estimé à  $0,3 \text{ g}\cdot\text{kg}^{-1}$  de plomb initialement présent dans la structure. Cela représente un total de 63 kg de plomb émis par le toit de la cathédrale et 75 kg de plomb émis par la flèche. Il est supposé que la combustion de la flèche a eu lieu pendant la première heure de l’incendie et que la combustion de la charpente a duré trois heures à partir du début de l’incendie.

Les hypothèses, illustrées dans la figure 3.6, sont les suivantes :

- **17 :00 – 18 :00 UTC :** 75 kg de plomb émis par la flèche et 1/6 des 63 kg de plomb de la charpente a été émis au cours de cette heure pour un total de  $80,5 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  ;
- **18 :00 – 19 :00 UTC :** 1/2 des 63 kg de plomb de la charpente a été émis au cours de cette heure pour un total de  $31,5 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  ;
- **19 :00 – 20 :00 UTC :** 1/3 des 63 kg de plomb de la charpente a été émis pour un total de  $21 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  ;

Une représentation de la distribution granulométrique des particules de monoxyde de plomb est considérée. Il s’agit de l’hypothèse 1 formulée par l’INERIS (2019) avec 4 tailles

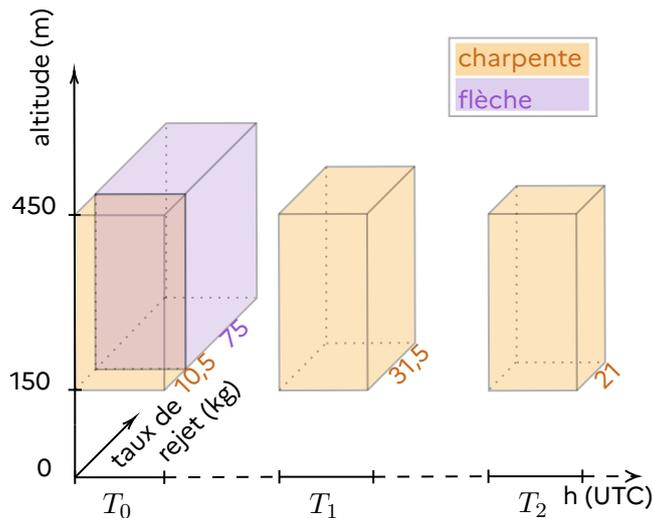


Figure 3.6 – Émissions de plomb considérées lors de l'incendie de la cathédrale Notre-Dame (INERIS, 2019).

de particules :  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$ ,  $PM_{d=50}$ , où "d" représente le diamètre de Stokes avec une masse volumique de  $9\,500\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .

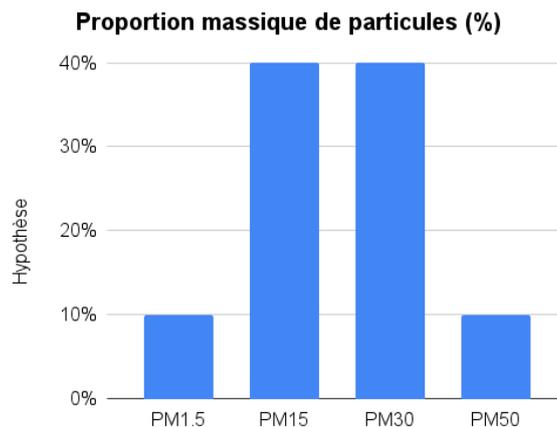


Figure 3.7 – Distribution granulométrique massique considérée correspondant à l'hypothèse 1 du document (INERIS, 2019). Les particules considérées sont des  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$ , et  $PM_{d=50}$ , avec "d" le diamètre.

La quantité totale de masse émise par la flèche et la charpente de la cathédrale est répartie dans le tableau 3.1 selon la granulométrie indiquée dans la figure 3.7 et par heure d'émission de l'incendie. Ces émissions (tableau 3.1) forment le terme source utilisé dans la suite de cette application et notées  $m_{\text{INERIS}}$ .

— **Hauteur effective :**

La hauteur effective atteinte par le panache est estimée entre 150 m et 450 m (INERIS, 2019). Nous considérons dans la suite une source continue sur la verticale entre ces deux valeurs.

Outre l'émission, la vitesse de dépôt est une donnée d'entrée du modèle de dispersion et détaillé dans la section 2.3.

Diamètre de particule	$d_p(T_0)$	$d_p(T_1)$	$d_p(T_2)$
1,5 $\mu\text{m}$	8,5	3,1	2,1
15 $\mu\text{m}$	34,2	12,6	8,4
30 $\mu\text{m}$	34,2	12,6	8,4
50 $\mu\text{m}$	8,5	3,1	2,1

Table 3.1 – Taux d'émission de plomb  $d_p$  (en  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) en fonction de la distribution granulométrique (figure 3.7) et des émissions répertoriées dans la figure 3.6.

### 3.4.2 Configuration d'inversion

Les paramètres descriptifs du système inverse sont définis ci-dessous.

- y** : La simulation de la dispersion atmosphérique du rejet  $\mathbf{m}_{\text{INERIS}}$  formulé ci-dessus avec les analyses météorologiques nous permet d'obtenir une estimation de concentrations dans l'air. On définit les observations  $\mathbf{y}$  de ce cas de manière synthétique comme les concentrations résultantes en fonction des trois stratégies de prélèvement décrites dans les figures 3.3, 3.4 et 3.5;
- $\mathbf{x}_b$**  : Sauf si indication contraire, les tests sont effectués sous l'hypothèse d'une ébauche égale à  $\mathbf{m}_{\text{INERIS}}$ ;
- H** : La matrice source-récepteur **H** est construite (figure 3.8) à partir des concentrations obtenues à chaque observation en fonction d'un débit unitaire et pour une espèce  $\text{PM}_x$  donnée. Deux manières de définir cette matrice sont introduites.

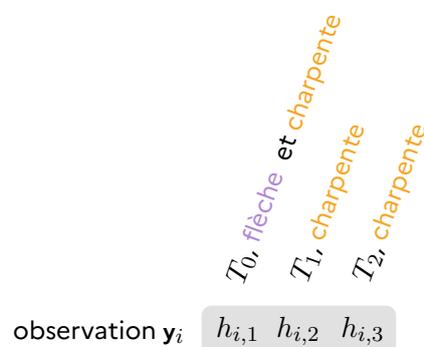


Figure 3.8 – Coefficients de la matrice **H** pour une ligne  $i$  relative à une observation  $\mathbf{y}_i$  et pour trois colonnes relatives aux impulsions formulées en fonction des émissions (figure 3.6)

1. **Avec les données analysées** : Pour tester l'implémentation des méthodes inverses;
  2. **Avec les données prévisionnelles** : Pour tester les méthodes inverses dans un cas où de l'erreur modèle a été générée.
- R** et **B** : La valeur  $r$  est définie par l'écart type du vecteur d'observation  $\mathbf{y}$  et est environ égale à  $1 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ . La valeur de  $b$  est définie par le ratio  $r/\lambda^2$  lorsque  $\lambda > 0$ , ou  $b = 0$  lorsque  $\lambda = 0$ ;  $\lambda$  étant estimé par la méthode GCV ou L-curve lors de l'application de la méthode du maximum *a posteriori*. Les scalaires  $r$  et  $b$  définissant les matrices d'erreur diagonales **R** et **B** sont réutilisés ici tels que pour la méthode MCMC à partir du poids  $\lambda$ .

La considération de la distribution granulométrique 3.7 implique la construction de 4 matrices  $\mathbf{H}$  :  $\mathbf{H}_{\text{PM}_d=1,5}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{PM}_d=15}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{PM}_d=30}$  et  $\mathbf{H}_{\text{PM}_d=50}$ . Ces dernières peuvent être concaténées pour former une matrice  $\mathbf{H}$  diagonale par bloc de matrice  $\mathbf{H}_{\text{PM}}$  considérée.

Nous définissons  $\mathbf{x}^*$  comme le vecteur solution exacte ou approchée retrouvé par méthode inverse. Dans le cas de l'application de la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov, ce vecteur est défini comme la moyenne des distributions obtenues pour chaque composante.

Plusieurs indicateurs statistiques sont utilisés pour évaluer chaque test :

- Le nombre  $\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$  correspond au nombre de degrés de libertés associés aux équations du système inverse ;
  - Le nombre de degrés de libertés associé au bruit (i.e. au résidu (3.7)  $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^*\|$ ) correspond à la trace de  $(\mathbf{I}_{N_{\text{obs}}} - \mathbf{H}\mathbf{K})$  ;
  - Le nombre de degrés de libertés associé au terme de régularisation est défini par la trace de  $(\mathbf{K}\mathbf{H})$  ;
- L'indicateur *Mean Normalized Gross Errors* (MNGE) est défini par la relation

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\mathbf{x}_{\text{INERIS}_i} - \mathbf{x}_i^*| / \mathbf{x}_i^*,$$

où  $\mathbf{x}^*$  correspond à la solution approchée retrouvée par la méthode du maximum *a posteriori* ;

- $\mathcal{J}_1(\mathbf{x}^*)$  correspond au coût final associé à  $\mathbf{x}^*$  pour le résidu et  $\mathcal{J}_2(\mathbf{x}^*)$  pour le terme de régularisation. La somme des deux termes  $\mathcal{J}_1 + \mathcal{J}_2$  forme le coût global résultant.

### 3.4.3 Résultats numériques

Les implémentations de la méthode du maximum *a posteriori* (paragraphe 3.2) avec les méthodes d'estimation du poids  $\lambda$  attribué au terme de régularisation de Tikhonov, la L-curve et la GCV, ainsi que de la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov (paragraphe 3.3) sont testées dans cette section. Les variables d'intérêt sont les taux de rejet, soit  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}\}$ . L'initialisation des variables d'intérêt à retrouver  $\mathbf{x}$  est l'ébauche  $\mathbf{x}_b$  pour les deux méthodes inverses.

Dans un premier temps, l'implémentation est vérifiée sans erreur modèle. Dans un second temps, une analyse de sensibilité est effectuée sur différents paramètres d'inversion avec de l'erreur modèle ajoutée dans le système.

#### Vérification d'implémentation

La méthode du maximum *a posteriori* basée sur l'algorithme L-BFGS-B permet de reconstituer le débit  $\mathbf{m}_{\text{INERIS}}$  décrit dans le tableau 3.1 sous contrainte de positivité de la solution. Cette solution est illustrée dans la figure 3.9 pour chaque temps d'émission, chaque stratégie de prélèvement (A, B, C) et chaque espèce considérée. Le facteur de corrélation entre la solution trouvée et le terme source  $\mathbf{m}_{\text{INERIS}}$  est égal à 1 et le minimum de la fonction de coût est égal à 0 pour les trois stratégies de prélèvement A, B et C. Le même résultat est obtenu en considérant la moyenne des distributions *a posteriori* retrouvées par la méthode MCMC basée sur l'algorithme de Metropolis-Hastings.

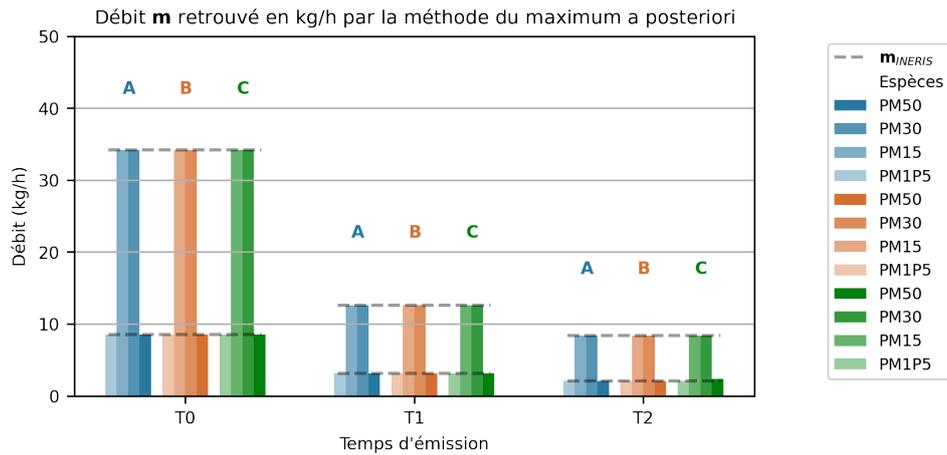


Figure 3.9 – Résultat  $m$  de débit reconstitué (en ordonnée) pour chaque temps d'émission (en abscisse), pour chaque stratégie de prélèvement A, B et C (en bleu, orange et vert) et pour chaque espèce (du plus clair pour les particules de petit diamètre au plus foncé pour les particules de plus grand diamètre), avec  $m_b = m_{INERIS}$ .

### Ajout d'erreur modèle

De l'erreur modèle est à présent introduite en conservant les observations synthétiques  $y$  générées à partir des données météorologiques d'analyse et en utilisant la matrice source-récepteur  $H$  définie à partir des prévisions. Il est à noter que le coût associé au vecteur  $m_{INERIS}$  est ainsi différent de zéro ; ce vecteur n'est plus la solution exacte de notre problème inverse.

Dans la suite, une première étude est effectuée pour comparer les deux méthodes d'estimation du poids donné à l'*a priori*  $\lambda$  implémentées dans ces travaux avec une inversion globale des espèces. Cette étude permet de fixer la méthode à utiliser pour les analyses qui suivent. Ensuite, une inversion indépendante est effectuée pour appréhender les différences entre les espèces considérées. Enfin, la dernière étude est une analyse de sensibilité au paramètre d'ébauche. Les trois stratégies de prélèvement (A, B, C) sont comparées dans l'objectif d'obtenir des informations relatives à l'impact de la disposition temporelle et spatiale des observations pour cet incendie.

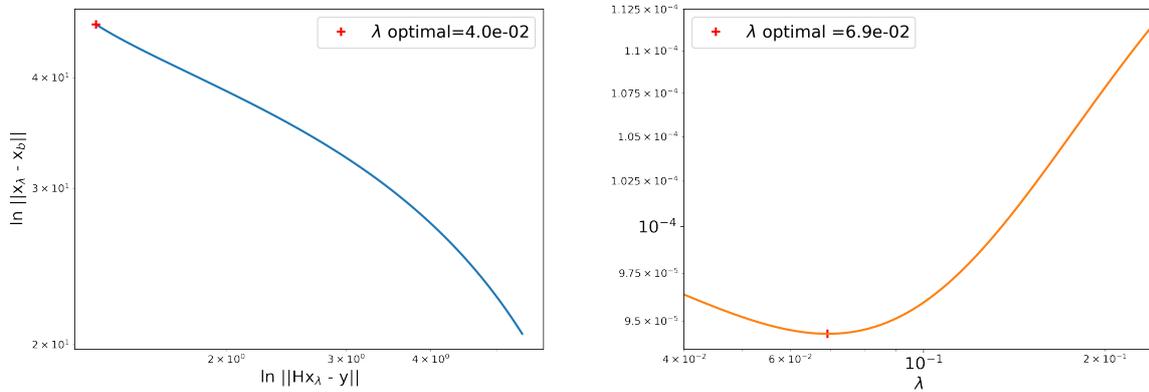
#### — Comparaison des méthodes d'estimation de $\lambda$ :

Les deux méthodes d'estimation de  $\lambda$  sont testées sous les hypothèses précédemment énoncées. Les résultats des indicateurs statistiques, du nombre de degrés de libertés et du coût final obtenu par l'application de la GCV et de la L-curve sont reportés dans le tableau 3.2. De plus, les courbes obtenues lors du processus d'estimation de la valeur optimale de  $\lambda$  sont représentées dans les figures 3.10a et 3.10b pour la stratégie A avec les méthodes L-curve et GCV, respectivement.

On remarque qu'aucun "genou" de courbe n'est trouvé pour la méthode de la L-curve, et ainsi la valeur attribuée à  $\lambda$  est par défaut la plus petite valeur propre issue de la décomposition SVD de  $H$ . Or, plus la valeur de  $\lambda$  est grande, plus le poids attribué au terme de régularisation est important qui, dans ce cas de figure, fait référence au vecteur  $m_{INERIS}$ . Ainsi, plus la valeur de  $\lambda$  est grande, plus l'erreur MNGE calculée sur la base de  $m_{INERIS}$  sera faible. C'est pourquoi, la méthode de la GCV tend à réduire l'erreur MNGE pour la stratégie A par rapport à la L-curve et la méthode L-curve tend à réduire l'erreur MNGE pour la stratégie C par rapport à la GCV.

Stratégie	$\lambda$	PM <sub>d=1,5</sub> , PM <sub>d=15</sub> , PM <sub>d=30</sub> , PM <sub>d=50</sub>				R	MNGE	
		$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{J}_1(\mathbf{x}^*)$	$\mathcal{J}_2(\mathbf{x}^*)$			
		$\ \mathbf{H}\mathbf{x}^* - \mathbf{y}\ $	$\ \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b\ $	$\ \mathbf{H}\mathbf{x}^* - \mathbf{y}\ $	$\lambda^2 \ \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b\ $			
L-curve	A	$4,0 \cdot 10^{-2}$	116	12	0,66	0,07	0,99	0,15
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0,06	0,04	0,97	0,38
	C	$4,8 \cdot 10^{-2}$	44	4	0,13	0,04	0,99	0,13
GCV	A	$6,9 \cdot 10^{-2}$	118	10	0,64	0,03	0,99	0,12
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0,06	0,04	0,97	0,38
	C	$7,8 \cdot 10^{-3}$	36	12	0,01	0,02	0,96	0,59

Table 3.2 – Résultats d’inversion pour la méthode GCV et la méthode L-curve avec inversion globale des espèces PM<sub>d=1,5</sub>, PM<sub>d=15</sub>, PM<sub>d=30</sub>, PM<sub>d=50</sub>, et  $\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{\text{INERIS}}$ . Le scénario A contient 128 observations, le scénario B contient 96 observations et le scénario C contient 48 observations pour chaque espèce.



(a) Application de la méthode L-curve, stratégie A (b) Application de la méthode GCV, stratégie A

Figure 3.10 –  $\lambda$  optimal retrouvé par deux méthodes d’estimation lorsque le vecteur d’ébauche  $\mathbf{x}_b$  est égal à la solution  $\mathbf{m}_{\text{INERIS}}$  que l’on souhaite retrouver.

En étudiant l’indicateur  $\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$  lié aux observations, on remarque que la stratégie A est exploitée à 91 % pour résoudre le système inverse, c’est-à-dire que 116 observations permettent d’apporter de l’information sur les 128 de la stratégie A pour minimiser le résidu  $\|\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ . Les stratégies B et C sont exploitées à 86 % et de 75 à 92 % pour les deux méthodes d’estimation de  $\lambda$ . Par ailleurs, la stratégie A, qui est une stratégie étendue de la stratégie B, permet d’apporter 33 informations supplémentaires au système inverse par rapport à la stratégie B. Et la stratégie B, qui est une stratégie étendue de la stratégie C, permet d’apporter 36 informations supplémentaires au système inverse avec la *L-curve* et 47 avec la GCV, par rapport à la stratégie C. Ainsi, plus la stratégie de prélèvement est étendue, plus des informations sont exploitées par le système inverse.

Cependant, on remarque que pour la stratégie la plus étendue, la stratégie A, le coût associé au résidu (obtenu par l’équation (3.7)) est supérieur au coût des stratégies B et C. La stratégie A diffère des stratégies B et C par le fait qu’il existe des prélèvements sur la première heure d’émission de l’incendie, heure pour laquelle la quantité émise est la plus importante (62 % de la masse totale émise au temps  $T_0$ , 23 % pour le temps

$T_1$  et 15 % pour le temps  $T_2$ ). Or, plus une quantité importante de polluant est rejetée, plus la différence entre les concentrations obtenues *via* les données d'analyse et de prévision météorologique s'accroît. Par conséquent, le coût (obtenu par l'équation (3.7)) associé au résidu de la stratégie A est supérieur aux coûts des autres stratégies lorsque de l'erreur modèle importée par la météo est présente dans le système.

Globalement, le coût résultant associé à la méthode de la L-curve est plus élevé ou égal au coût résultant de la méthode de la GCV dans cette configuration. Une façon de procéder consiste à considérer les deux méthodes, de comparer les coûts obtenus pour les deux valeurs de  $\lambda$  générées, et d'exploiter le  $\lambda$  fournissant le coût le plus faible.

#### — Inversion indépendante des espèces :

Dans cette étude, les résultats des indicateurs statistiques sont étudiés indépendamment pour chaque espèce  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$  et  $PM_{d=50}$  avec la méthode de la GCV pour l'estimation du poids  $\lambda$  attribué à l'*a priori*. Une inversion globale des espèces, effectuée dans l'étude ci-dessus, est une inversion indépendante des espèces par bloc *via* la matrice  $\mathbf{H}$ . Le coût de l'inversion globale obtenu par la méthode GCV est donc le cumul des coûts obtenus indépendamment. Ceci est vrai car les matrices d'erreur d'observation et d'erreur *a priori* qui composent le problème sont supposées diagonales dans ces travaux et sont ainsi les mêmes quelque soit le type d'inversion considéré dans cette étude (indépendante ou globale).

Les scores résultants pour chaque espèce  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$  et  $PM_{d=50}$ , par application de l'algorithme L-BFGS-B et de la méthode d'estimation de  $\lambda$  qui génère le coût le plus faible, la GCV, sont reportés dans le tableau 3.3.

	Stratégie	$\lambda$	$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{J}_1(\mathbf{x}^*)$	$\mathcal{J}_2(\mathbf{x}^*)$	R	MNGE
			$\ \mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\ $	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_b\ $	$\ \mathbf{H}\mathbf{x}^* - \mathbf{y}\ $	$\lambda^2 \ \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b\ $		
$PM_{d=1,5}$	A	$7,4 \cdot 10^{-2}$	30	2	0,02	0,0	1	0,12
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	21	3	0,0	0,0	0,98	0,38
	C	$8,5 \cdot 10^{-3}$	9	3	0,0	0,0	0,99	0,57
$PM_{d=15}$	A	$6,7 \cdot 10^{-2}$	30	2	0,29	0,03	0,99	0,13
	B	$1,2 \cdot 10^{-2}$	21	3	0,03	0,02	0,98	0,38
	C	$8,5 \cdot 10^{-3}$	9	3	0,01	0,01	0,99	0,57
$PM_{d=30}$	A	$4,0 \cdot 10^{-2}$	29	3	0,32	0,01	0,99	0,13
	B	$1,2 \cdot 10^{-2}$	21	3	0,03	0,02	0,98	0,37
	C	$7,8 \cdot 10^{-3}$	9	3	0,0	0,01	0,99	0,56
$PM_{50}$	A	$6,3 \cdot 10^{-2}$	29	3	0,02	0,0	0,99	0,14
	B	$1,2 \cdot 10^{-2}$	21	3	0,0	0,0	0,98	0,35
	C	$8,5 \cdot 10^{-3}$	9	3	0,0	0,0	0,99	0,56

Table 3.3 – Résultats d'inversion indépendante des espèces  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$ ,  $PM_{d=50}$  pour  $\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{\text{INERIS}}$  avec la méthode GCV. Le scénario A contient 32 observations, la stratégie B contient 24 observations et la stratégie C, 12 observations pour chaque espèce.

Il apparaît que les  $PM_{15}$  et  $PM_{30}$  sont responsables du coût associé à l'erreur modèle pour la stratégie A avec  $\mathcal{J}_1(PM_{15} \text{ et } PM_{30}) \sim 0,3$  contre 0,02 pour les  $PM_{1,5}$  et  $PM_{50}$ . Comme précisé précédemment, cette erreur modèle concerne la première heure d'émission ( $T_0$ )

pour laquelle 62 % de la masse totale est émise. En particulier, 50 % de la masse totale émise est répartie sur les  $PM_{d=15}$  et  $PM_{d=30}$  au premier temps d'émission et 12 % de la masse totale émise sur les  $PM_{d=1,5}$  et  $PM_{d=50}$  au premier temps d'émission. La combinaison de l'erreur modèle provoquée par les différences météorologiques et l'importante quantité émise par les  $PM_{d=15}$  et les  $PM_{d=30}$  sur la première heure de l'émission par rapport à l'émission totale implique un coût plus élevé pour la stratégie A et les espèces  $PM_{d=15}$ ;  $PM_{d=30}$  par rapport aux autres espèces et par rapport aux autres stratégies de prélèvement.

Une inversion indépendante des espèces peut permettre d'identifier à quel point les espèces sont plus ou moins bien représentées par les observations. En l'occurrence, on constate le même nombre de degrés de liberté attribué au résidu quelque soit l'espèce considérée, i.e. le même nombre d'information est extrait des observations quelque soit l'espèce considérée  $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$  ou  $PM_{d=50}$ . Les stratégies de prélèvement A, B et C permettent toutes de couvrir de manière similaire les particules de plomb de diamètre 1,5, 15, 30 et 50  $\mu m$ .

#### — Étude de sensibilité à l'ébauche :

Nous nous intéressons à présent au rôle de l'ébauche  $\mathbf{x}_b$  qui constitue une estimation *a priori* du rejet disponible dans le système inverse. Cette information, difficile à quantifier en situation d'urgence, est étudiée par le biais d'une analyse de sensibilité pour différents  $\mathbf{x}_b$ . Le vecteur nul  $\mathbf{0}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ , en principe utilisé lorsqu'aucune information n'est disponible pour définir l'ébauche, sera dans un premier temps testé. Nous testerons ensuite le système inverse en présence d'information biaisée (sous-estimée et surestimée par rapport la solution  $\mathbf{m}_{INERIS}$  attendue) :  $\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{INERIS}/2$  et  $\mathbf{x}_b = 2\mathbf{m}_{INERIS}$ . Pour finir, un vecteur constant et différent du vecteur nul  $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ , où chaque composante s'exprime en  $kg \cdot h^{-1}$ , est testé pour évaluer l'impact d'une ébauche constante et différente de  $\mathbf{0}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$  sur la cinétique temporelle des émissions à reconstruire. Les scores des indicateurs statistiques résultants de la méthode du maximum *a posteriori* avec la méthode GCV sont répertoriés dans le tableau 3.4 pour chaque scénario considéré (A, B ou C).

On remarque alors qu'une information, même partielle, sur l'ébauche  $\mathbf{x}_b$  améliore le score de l'indicateur statistique MNGE. La figure 3.11 illustre la solution trouvée pour une ébauche constante définie à  $\mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ . La figure 3.11a représente la solution retrouvée par l'application de la méthode semi-déterministe MAP et la figure 3.11b représente la solution moyenne retrouvée par l'application de la méthode MCMC ainsi que ses incertitudes représentées par les barres noires et correspondantes à l'écart type des distributions trouvées. En ordonnée nous retrouvons l'intensité de rejet (en  $kg \cdot h^{-1}$ ) et en abscisse les trois heures d'émission ( $T_0, T_1, T_2$ ) et pour chaque heure la distribution associée aux quatre tailles de particules ( $PM_{d=1,5}$ ,  $PM_{d=15}$ ,  $PM_{d=30}$ ,  $PM_{d=50}$ ). Les distributions obtenues par la méthode MCMC sont disponibles en annexe C.1. Il existe des différences entre le résultat obtenu du MAP et le résultat moyen obtenu du MCMC liées à la technique d'échantillonnage. En effet, nous comparons la valeur du maximum *a posteriori* et une moyenne de la distribution *a posteriori*.

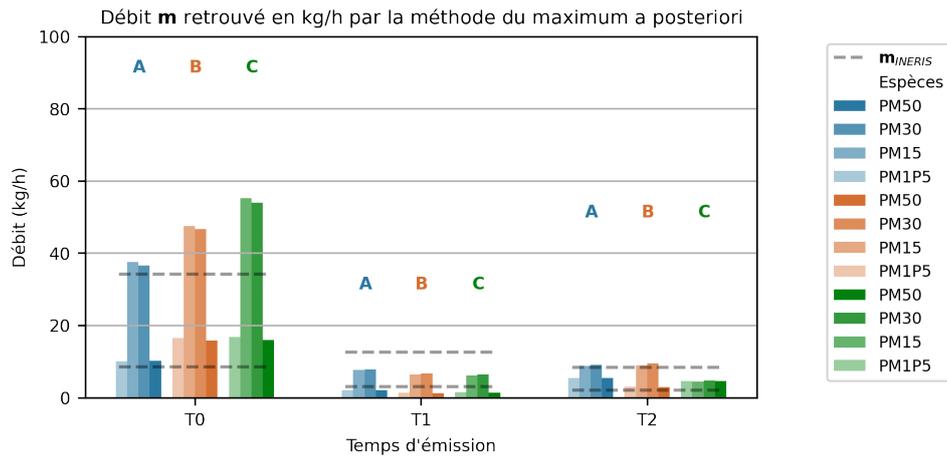
On remarque qu'une ébauche constante de  $\mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$  permet de reconstituer la cinétique d'émission temporelle de l'incendie. Ce résultat est également valable pour  $\mathbf{x}_b = \mathbf{0}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ . Nous observons que l'absence de données durant la première heure de l'incendie (stratégies B et C) concorde avec les incertitudes élevées estimées par la méthode MCMC et permettent de reconstituer partiellement l'émission sur la première heure de l'incendie

Stratégie	$\lambda$	PM <sub>d=1,5</sub> , PM <sub>d=15</sub> , PM <sub>d=30</sub> , PM <sub>d=50</sub>				R	MNGE	
		$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{D}_{\mathcal{L}}$	$\mathcal{J}_1(\mathbf{x}^*)$	$\mathcal{J}_2(\mathbf{x}^*)$			
		$\ \mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\ $	$\ \mathbf{x} - \mathbf{x}_b\ $	$\ \mathbf{H}\mathbf{x}^* - \mathbf{y}\ $	$\lambda^2 \ \mathbf{x}^* - \mathbf{x}_b\ $			
$\mathbf{x}_b = \mathbf{0}$	A	$4,0 \cdot 10^{-2}$	116	12	1	2	0,98	0,31
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0	0	0,98	0,24
	C	$7,3 \cdot 10^{-3}$	36	12	0	0	0,96	0,66
$\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{\text{MINERIS}}/2$	A	$4,0 \cdot 10^{-1}$	116	12	1	0	0,99	0,23
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0	0	0,97	0,3
	C	$5,2 \cdot 10^{-2}$	44	4	0	0	1	0,4
$\mathbf{x}_b = 2\mathbf{m}_{\text{MINERIS}}$	A	$4,0 \cdot 10^{-2}$	116	12	1	2	0,99	0,19
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0	0	0,96	0,54
	C	$7,8 \cdot 10^{-3}$	36	12	0	0	0,96	0,5
$\mathbf{x}_b = 10\mathbf{m}_{\text{MINERIS}}$	A	$4,0 \cdot 10^{-1}$	116	12	1	1	0,97	0,44
	B	$1,1 \cdot 10^{-2}$	83	13	0	0	0,95	0,47
	C	$7,8 \cdot 10^{-3}$	36	12	0	0	0,95	0,7

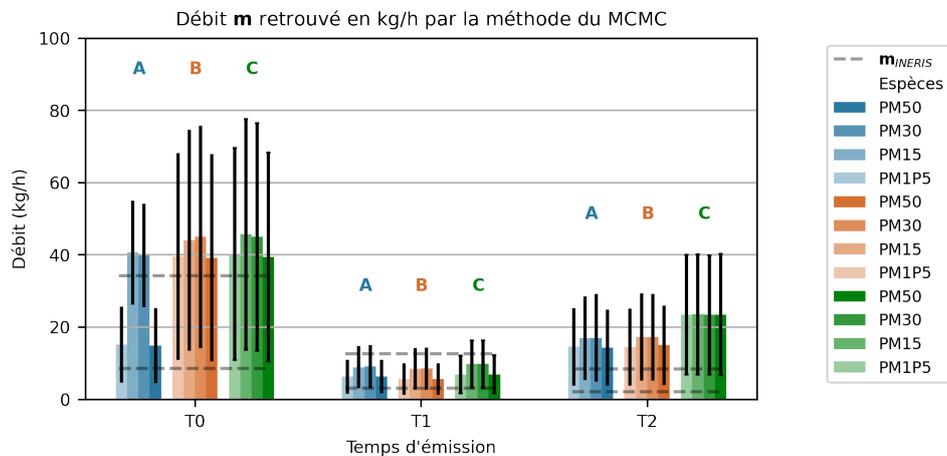
Table 3.4 – Résultats d’inversion pour différentes valeurs d’ébauche  $\mathbf{x}_b$  avec la méthode du maximum *a posteriori* avec la GCV et une inversion globale des espèces PM<sub>d=1,5</sub>, PM<sub>d=15</sub>, PM<sub>d=30</sub>, PM<sub>d=50</sub>. Le scénario A contient 128 observations, le scénario B contient 96 observations et le scénario C contient 48 observations pour chaque espèce.

de part le temps de transfert des polluants dans l’atmosphère. En effet, en considérant un écoulement uniquement porté par un vent modéré ( $\sim 4 - 5 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  à 10 m observé de 17:00 à 19:00 UTC pendant l’incendie), une station située dans la direction du vent à 6 km d’une source sera impactée au bout de 20 – 40 minutes de rejet.

Pour les deux méthodes (MCMC et MAP), l’intensité de rejet retrouvée pour la stratégie de prélèvement C ne permet pas de reconstituer la distribution granulométrique des particules sur la dernière heure d’émission de l’incendie. Par conséquent, une stratégie de prélèvement élaborée en champs proche (0 – 6 km) ne permet pas de tenir compte de la ségrégation des espèces sédimentées et non sédimentées sur la dernière heure de l’incendie.



(a) Solution obtenue par la méthode du maximum a posteriori



(b) Solution moyenne obtenue par la méthode MCMC.

Figure 3.11 – Résultat  $x$  de débit reconstitué (en ordonnée) pour chaque temps d'émission (en abscisse), pour chaque stratégie de prélèvement A, B et C (en bleu, orange et vert) et pour chaque espèce (du plus clair pour les particules de petit diamètre au plus foncé pour les particules de plus grand diamètre), avec  $x_b = 10^{\mathbb{R}^{N_{\text{var}}}}$  et les composantes en  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ .

## Synthèse

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à la caractérisation du terme source en terme de dynamique temporelle du taux de rejet, par la modélisation inverse basée sur l'utilisation conjointe de mesures et d'un modèle de dispersion.

Ce chapitre a présenté les méthodes de modélisation inverse déterministe et bayésienne implémentées et appliquées à la dispersion atmosphérique de polluants à la suite d'incendies de grande ampleur. Le cadre de la modélisation bayésienne sur lequel se base les méthodes inverses a d'abord été introduit, suivi des différentes variables intervenant dans la résolution du problème inverse. Une méthode de minimisation déterministe a été présentée, à savoir la méthode du maximum a posteriori. Sous des hypothèses gaussiennes, la solution du système inverse est l'estimateur *Best Linear Unbiased Estimator* (BLUE). Le minimum est obtenu en étudiant les variations de la fonction de coût correspondante. Sous contraintes, l'algorithme L-BFGS-B suivant une méthode quasi-Newton est utilisé pour garantir la positivité du taux de

rejet. Enfin, l'introduction de  $\lambda$  élimine la nécessité d'estimer les matrices de covariance  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{B}$ . L'estimation de  $\lambda$ , qui constitue le poids donné au terme de régularisation, peut être effectuée par échantillonnage. Minimiser de manière déterministe tout en échantillonnant l'un des paramètres de manière probabiliste nous plonge dans un cadre semi-bayésien. Deux méthodes d'estimation de  $\lambda$  par échantillonnage sont présentées. La première, définie dans un cas où le système est linéaire, est appelée "*L-curve*". Elle permet d'estimer la valeur optimale de  $\lambda$  lorsque la courbure de la courbe paramétrique, qui définit d'une part l'écart entre les prédictions et les observations et d'autre part l'écart entre la solution et son ébauche, est maximale. La seconde méthode, applicable dans le cas où le système est non linéaire, est appelée "*Generalized Cross Validation*" (GCV). Le  $\lambda$  optimal est déterminé lorsque l'erreur de prédiction pour plusieurs ensembles d'observations tirés des observations totales disponibles est minimale. Une méthode bayésienne est également présentée pour non seulement retrouver le maximum de probabilité *a posteriori* mais également les incertitudes associées. Des hypothèses gaussiennes pour caractériser la vraisemblance et l'*a priori* sont retenues dans cette configuration. La méthode bayésienne choisie pour échantillonner le rejet est basée sur l'algorithme de Metropolis Hastings, qui est une méthode de type Monte Carlo par Chaîne de Markov (MCMC).

L'implémentation de ces diverses méthodes a été validée sur le cas synthétique de l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame de Paris. De l'erreur modèle générée par les données météorologiques est exploitée pour tester le fonctionnement des méthodes pour trois stratégies de prélèvement définies suivant une certaine couverture spatio-temporelle. Il en résulte qu'une stratégie de prélèvement étendue sur 0 – 6 km ne permet pas de reconstruire la granulométrie des particules émises sur la dernière heure de l'incendie. En outre, des informations disponibles à partir de 18:00 UTC sur cette même étendue permettent de reconstituer partiellement l'émission sur la première heure de l'incendie (17:00 – 18:00 UTC).

## Chapitre 4

# Application à un incendie d'entrepôt de grande ampleur

Dans le chapitre précédent, plusieurs méthodes inverses pour la reconstitution de la source de fumées d'un incendie de grande ampleur ont été présentées et leur implémentation validée sur un cas synthétique. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à un incendie survenu à Aubervilliers près de Paris, en France, le 16 avril 2021. L'intérêt est porté sur l'estimation de la masse émise et la hauteur d'émission ainsi que des incertitudes associées. Pour ce faire, la méthode de Méthode de Monte-Carlo par chaînes de Markov introduite dans le chapitre précédent est appliquée et des ajustements du système inverse rendus nécessaires par les conditions opérationnelles sont proposés. Il ne s'agit plus seulement de retrouver les caractéristiques du rejet de fumées, mais aussi d'autres paramètres non moins pertinents tels que : l'inversion de la pollution de fond présente dans l'atmosphère avant l'incendie, l'inversion d'un paramètre représentatif de l'erreur modèle, de l'erreur d'ébauche, et d'une méthode pour l'inversion de la hauteur d'émission.

Ces propositions d'ajustement ainsi que des études de sensibilité réalisées à ce sujet sont détaillés dans un manuscrit soumis "Bayesian inversion of emissions from large urban fire using in situ observations" (Launay et al., 2024) que nous reproduisons dans les pages suivantes et qui compose une première partie de ce chapitre 4.1. Dans cet article, le cas d'intérêt est entièrement décrit en section 4.1.1 "Fire of interest", la section 4.1.2 "Methodology" correspond à la méthode MCMC déjà introduite dans le chapitre 3 ainsi que les ajustements de la méthode inverse proposés. Des indicateurs statistiques sont également présentés dans le but d'étudier la performance de la méthode inverse sur les résultats de concentration dans l'air par comparaison des prédictions et des concentrations réelles observées. La section 4.1.3 "Numerical experiments" de l'article contient les analyses de sensibilité effectuées pour les divers ajustements de méthode et la section 4.1.4 contient les conclusions tirées de cette étude. En outre de cet article, une étude de sensibilité de la vitesse de dépôt sur les résultats d'inversion de cet incendie d'intérêt est réalisée dans la partie 4.2 de ce chapitre.

Enfin, une identification du taux de production de particules à partir du rejet retrouvé par inversion est présentée dans la dernière partie 4.3 de ce chapitre. De plus, une modélisation de la surhauteur est effectuée avec la formule de Zonato et comparée avec les résultats de hauteur d'émission obtenue par la méthode inverse décrite dans l'article.

## 4.1 Bayesian inversion of emissions from large urban fire using in situ observations

### 4.1.1 Fire of interest

#### 4.1.1.1 Fire and smoke information

The case we are interested in is a 4000 m<sup>2</sup> tool warehouse that caught fire in Aubervilliers, on the outskirts of Paris, France, on 16 April 2021 at around 3 :30 UTC. The fire gave off smoke for several hours, which could be seen and smelt for kilometres from the source. According to the fire brigade's assessment, this urban blaze went through several phases. The fire, which was in its full development phase between 04 :30 and 06 :30, was circumscribed by 07 :30 and drowned by 08 :30 UTC, requiring the deployment of hundreds of firefighters.

Numerous surface air quality monitoring stations in Paris and its inner suburbs (from Airparif agency <https://www.airparif.asso.fr>), as well as a station operated by the Laboratoire Central de la Préfecture de Police, positioned along the smoke plume's trajectory, recorded abnormally high PM<sub>10</sub> concentration levels (figure 4.1). The maximum PM<sub>10</sub> concen-

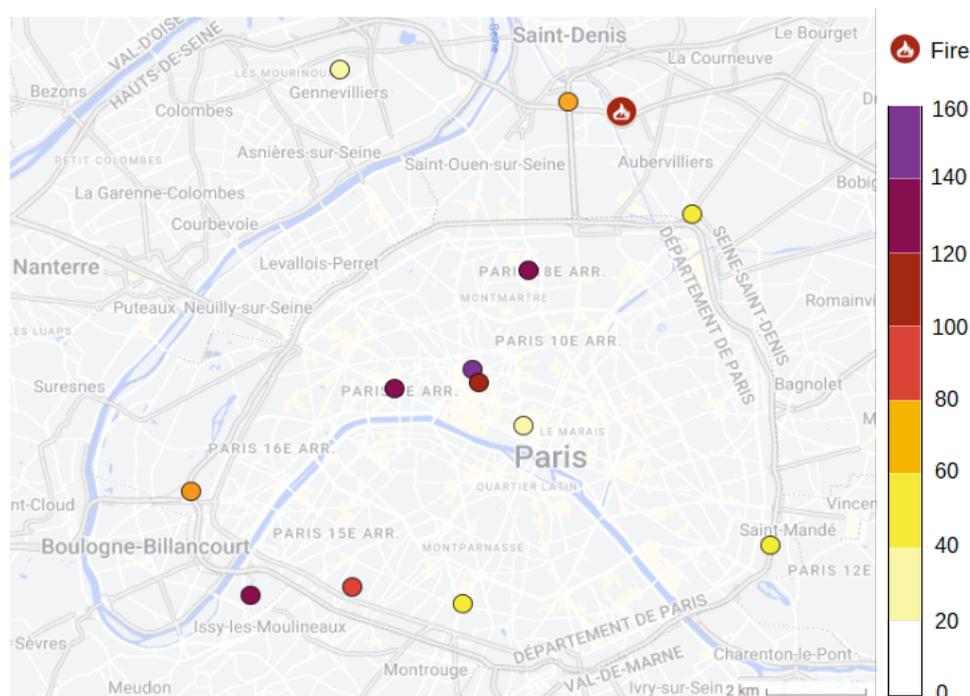


Figure 4.1 – Maximum PM<sub>10</sub> concentration of observations at each station available during the fire (in  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ).

tration was obtained at the Boulevard Haussmann station, 6 km from the source, with a value of  $160 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  (figure 4.2). The peak concentration obtained can be seen in figure 4.2, correlating in particular with the intensive phase of the fire. A smoke plume signal was observed at several stations, linked to a stable north-east wind direction over time.

The reanalysed meteorological fields provided by Météo-France's AROME forecasting model (Seity et al., 2011) are examined to assess the dispersive conditions of that day. The fire broke out at sunrise in a neutral atmospheric boundary layer with very slight thermal turbulence and temperatures below 5 °C. Due to moderate wind speeds and absence of precipitation, the plume signal was strong. These meteorological conditions led to smoke being dis-

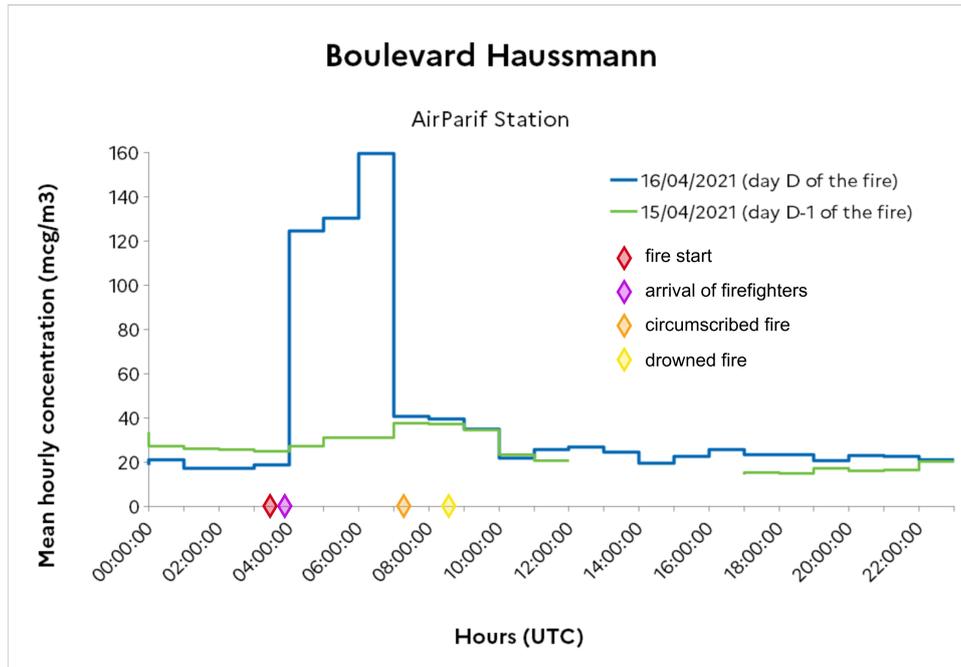


Figure 4.2 – Observed PM<sub>10</sub> concentrations at Boulevard Haussmann station showing the greatest impact of the Aubervilliers’s fire plume.

persed in a single direction for the duration of the fire. Photos taken from the ground during the fire corroborate this analysis and allow us to estimate the effective height of the smoke emission between 100 and 300 metres from the ground.

#### 4.1.1.2 Smoke plume simulation

The model used for the dispersion simulations is the Parallel Micro Swift Spray (PMSS) (Oldrini et al., 2017) model. This is a model chain in which the Swift model first diagnoses the atmospheric flows over a predefined domain of 25 km×25 km at ~ 50-metre resolution. Swift is fed with the reanalysed fields of the AROME forecasting model (Seity et al., 2011) from Météo-France with a resolution of 0.025° providing hourly meteorological fields. The Spray model, based on a Lagrangian approach, then uses the output data from the Swift model and the descriptive parameters of the smoke source to calculate the concentration and deposition fields (Tinarelli et al., 2013; Trini Castelli et al., 2018).

To be consistent with the available observations, the model settings are chosen to represent PM<sub>10</sub> concentrations. Numerous studies have shown that most of the PM<sub>10</sub> particles measured in fire smoke plumes are fine or even ultrafine particles (Ouf et al., 2019; Sipkens et al., 2023). Consequently, the configuration chosen to represent the smoke particles in this study corresponds to a particle size of 1 μm in aerodynamic diameter. A sensitivity study of the dry deposition velocity  $w_d$  on the inversion results was carried out in a previous work (Launay et al., 2023) for three orders of magnitude, resulting in slight differences between the smoke source terms found. The influence of the deposition velocity seems negligible compared to the overall uncertainties of the inverse problem. Dry deposition rate of  $w_d = 0.05 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$  from experiments (Sehmel, 1980) is used in this work for the deposition computation based on Monin (1959) in the PMSS model.

Two ways of configuring the source are available in PMSS : as a horizontal surface source or as a volume source. The second option can provide emissions in the form of a piecewise

defined function, smoother vertically than the first option, which is a discrete description. The impact of the source type is analysed in this study.

The smoke source term parameters to be inverted are in practice release rates for different heights and times. The methodology used to find this source term parameters is defined in the following section 4.1.2.

## 4.1.2 Methodology

### 4.1.2.1 Bayesian inverse method

The method applied to retrieve the smoke source term parameters and their uncertainties is a Bayesian Monte Carlo sampling method detailed in D.1.

Within a Bayesian framework, the aim is to reconstruct the posterior distributions of a control vector. The main components to be recovered are those defining the smoke source term : the fire release rates per unit time for different emission heights defined by the vector  $\mathbf{m}$ . Other variables are also relevant to be inverted and are presented throughout the methodology section 4.1.2. Gaussian assumption are adopted to describe the prior  $\mathbf{m} \sim \mathcal{N}(\mathbf{m}_b, \mathbf{B})$  (equation (4.1a)) and the likelihood  $\mathbf{y}|\mathbf{m} \sim \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{m}, \mathbf{R})$  (equation (4.1b)) :

$$p(\mathbf{m}) = \frac{1}{|\mathbf{B}|^{1/2}(2\pi)^{N_m/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_b)^\top \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{m}-\mathbf{m}_b)}, \quad (4.1a)$$

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{m}) = \frac{1}{|\mathbf{R}|^{1/2}(2\pi)^{N_{\text{obs}}/2}} e^{-\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{m})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{m})}, \quad (4.1b)$$

where  $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}} \times N_{\text{obs}}}$  is the covariance matrix related to the observation and model error and  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_m \times N_m}$  is the covariance matrix related to the prior  $\mathbf{m}_b \in \mathbb{R}^{N_m}$ , added for regulation purposes. In the following  $\mathbf{R}$  and  $\mathbf{B}$  are modelled as symmetric and positive definite, respectively. Both covariance matrices, and more specifically the  $\mathbf{R}$  covariance matrix for uncertainties related to the likelihood function, control the uncertainties of the system. The assumed linear relationship between the  $N_{\text{obs}}$  available observations and the  $N_m$  variables of the smoke source to be inverted is described using a source-receptor matrix  $\mathbf{H}$ . This matrix, also called Jacobian, linearised or tangent operator, is built from forward simulation results obtained with unitary smoke source terms. Each coefficient  $h_{i,j}$  contained in  $\mathbf{H}$  corresponds to the prediction associated with observation  $j \in \{1, \dots, N_{\text{obs}}\}$  for a unit release rate  $\mathbf{m}_i$  with  $i \in \{1, \dots, N_m\}$ .

The smoke source term is found by MCMC sampling, by minimising the cost function (equation (4.2)) over  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}\}$  :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^\top \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)^\top \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_b). \quad (4.2)$$

In addition to the smoke source, it is possible to include other variables to be sampled by the inverse system. In particular, rather than predetermining the variables that define the covariance matrices  $\mathbf{R}$  and  $\mathbf{B}$  prior to the inversion process, they can be sampled directly using the MCMC method. An extension of this methodology, proposed in (Launay et al., 2023; Liu et al., 2017), takes the smoke source term  $\mathbf{m}$  and the associated uncertainties related to the model error as unknowns. The associated covariance matrix  $\mathbf{R}$  chosen as  $r \mathbf{I}_{N_{\text{obs}}}$  to limit the number of variables (for example in Chow et al., 2008; Dumont Le Brazidec et al., 2023; Wiñarek et al., 2012), and the variable to be sampled is then the scalar  $r$ . This allows the value of  $r$  to be sampled during the MCMC process, enabling the source to be sampled in a wider space and avoiding the need for the user to provide a potentially over-constrained estimate

for  $r$ . Moreover this type of extension provides the posterior distribution associated to  $r$  (the “uncertainties of the uncertainties”).

Since this is a variable sampled during the inversion process, it must be assigned a prior probability distribution. A uniform distribution on  $r$  scalar is chosen. The resulting cost function is the sum of equation (4.2)’s right-hand side and the normalisation term  $\log \left( (2\pi)^{N_{\text{obs}}} |\mathbf{R}| \right)$ .

On the basis of this inversion framework, the smoke source term to be recovered consists of a release rate at each predefined time step and emission heights. Since  $N_{\text{height}}$  is the number of emission heights and  $N_{\text{time}}$  the number of emission time steps, this implies the inversion of  $N_{\text{m}} = N_{\text{height}} \times N_{\text{time}}$  variables describing the smoke source term. Introducing  $r$  as a variable to be sampled adds an unknown variable to the system. With this current configuration, the vector of variables to be retrieved  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}, r\}$  is of dimension  $N_{\text{var}} = N_{\text{m}} + 1$ .

Fine-tuning of this method are proposed in the following section 4.1.2.2 to meet operational response needs for the dispersion of plumes originating from large fires. These optimisations consist in i) adding variables to distinguish background pollution’s contribution to the observed concentrations and ii) adding a variable describing the prior error in the inversion.

#### 4.1.2.2 Inversion fine-tuning

##### — Background pollution :

A large-scale fire disrupts the environment by causing additional pollution on top of the ambient pollution already present in the atmosphere. In this section, we wish to discriminate fire-related pollution and non-fire-related pollution, also called background pollution. The latter is difficult to estimate because of its sensitivity to various factors or influences such as emissions, atmospheric conditions, local ecosystems, chemical reactions, etc (Chen et al., 2020; Li et al., 2023).

In the event of accidental release, such as fires, estimates of background concentration can be based, for example, on the previous day’s fire, annual background concentrations, on satellite data (for example in Cho et al., 2023; van Donkelaar et al., 2010), etc. However, part of these methods require the assurance of similar conditions influencing background concentrations, as well as the possibility of collecting these data in an operational situation.

Rather than estimating background concentrations upstream of the inversion, they can be estimated within the inversion. Background concentrations then become variables to be retrieved by data assimilation, similarly to the characteristics of the smoke source. Given that the observation sites available from air quality network are broken down into “traffic” and “urban” categories, and that the fire occurred during the morning traffic peak linked to work commutes, two additional scalars of ambient concentrations per station type and constant over time are considered as variables to be sampled by the MCMC. The control vector  $\mathbf{x}$  to be sampled is then composed of  $\{\mathbf{m}, r, \mathbf{c}\}$  and of dimension  $N_{\text{var}} = N_{\text{m}} + 3$ , with  $\mathbf{c} = \{c_{\text{T}}, c_{\text{U}}\} \in \mathbb{R}^2$  for background concentrations determined by the type of station (T : traffic, U : urban).

The change is reflected in the Jacobian matrix  $\mathbf{H}$  (4.3), where two additional dimensionless columns are added. The first column added corresponds to observations from traffic-type stations for which the value 1 is assigned, 0 otherwise, and the second to

observations from urban-type stations.

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{1,1} & \cdots & h_{1,N_m} & 1 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ h_{i,1} & & h_{i,N_m} & 1 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ h_{N_{\text{obs}},1} & \cdots & h_{N_{\text{obs}},N_m} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Given the change in  $\mathbf{H}$ , and  $\mathbf{R} = r \mathbf{I}_{N_{\text{obs}}}$ , equations (3.2a) and (3.2b) evolve into (4.4a) and (4.4b), where  $\mathbf{c}_b = \{c_{\text{Tb}}, c_{\text{Ub}}\}$  represents the prior estimate of ambient concentrations :

$$p(\{\mathbf{m}, \mathbf{c}\}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_m+2} |\mathbf{B}|}} \times \exp\left[-\frac{1}{2} (\{\mathbf{m}, \mathbf{c}\} - \{\mathbf{m}_b, \mathbf{c}_b\})^T \times \mathbf{B}^{-1} (\{\mathbf{m}, \mathbf{c}\} - \{\mathbf{m}_b, \mathbf{c}_b\})\right], \quad (4.4a)$$

$$p(\mathbf{y}|\{\mathbf{m}, r, \mathbf{c}\}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_{\text{obs}}} r^{N_{\text{obs}}}}} \times \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\{\mathbf{m}, \mathbf{c}\}\|^2}{r}\right] \quad (4.4b)$$

This estimation method, deemed to meet operational requirements, is designed to recover background concentrations from observations unaffected by the plume.

— **Prior error :**

The covariance matrix  $\mathbf{B}$ , as indicated in section 4.1.2.1, quantifies the prior uncertainties and is usually chosen to be diagonal for the same reasons as for the matrix  $\mathbf{R}$ . Since no prior information is available to quantify the diagonal value(s) of the  $\mathbf{B}$  covariance matrix, it is proposed to include it in the inversion system.

The matrix  $\mathbf{B}$  quantifies the uncertainties associated with the  $\mathbf{m}$  variable vector related to the smoke release rates as well as with the  $\mathbf{c}$  variable vector when ambient concentrations are taken into account in the inversion. These variables are uncorrelated by nature, justifying the introduction of two scalars in the diagonal of  $\mathbf{B}$  :  $b_m \in \mathbb{R}$  and  $b_c \in \mathbb{R}$  respectively. Then, the matrix  $\mathbf{B}$  is defined as in (4.5) when background concentrations are inverted or not.

$$\mathbf{B} = \begin{cases} \left( \begin{array}{ccc|cc} b_m & 0 & 0 & & \\ 0 & \ddots & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & b_m & & \\ \hline & 0 & & b_c & 0 \\ & & & 0 & b_c \end{array} \right) & \text{if } \mathbf{c} \subset \mathbf{x}, \\ \left( \begin{array}{ccc} b_m & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & b_m \end{array} \right) & \text{else.} \end{cases} \quad (4.5)$$

By analogy with the sampling of the variable  $r$ , assuming Gaussian assumptions,  $b_m$  and  $b_c$  if they exist, are added to the system's unknowns and the term  $\log((2\pi)^{N_{\text{var}}}|\mathbf{B}|)$  is added to the cost function (equation (4.2)). The control vector  $\mathbf{x}$  to be sampled is then  $\{\mathbf{m}, r, \mathbf{c}, b_m, b_c\}$  and of dimension  $N_{\text{var}} = N_m + 5$ . A uniform distribution is used as prior knowledge on each  $b_m$  and  $b_c$  scalar. Sampling the two covariance matrices  $\mathbf{R}$  and  $\mathbf{B}$ , makes the system even more flexible for solving the inverse problem.

#### 4.1.2.3 Emission height inversion proposal

As the problem has been posed so far in section 4.1.2.1, the smoke source term to be recovered consists of a release rate for each predefined time step and emission heights. This source parameterisation is particularly relevant when there are a plume separation. For instance, this could be the case when the plume rise phenomenon leads the smoke to penetrate partially the inversion layer located above a convective boundary layer (Hanna and Paine, 1989; Korsakissok and Mallet, 2009). One way of modelling this phenomenon is to assume two plumes : one modelled above the boundary layer height and the other modelled below it.

But in most cases, an emission height, potentially varying over time, is usually used to define the smoke source of a large-scale fire. We wish to obtain a couple of (emission height; release rate) for each time step. To do this, the emission height is described as a new variable vector  $\mathbf{z}$  to be recovered. The fire smoke source term is then described by  $\mathbf{z}$  for the emission heights per time step (i.e.  $\mathbf{z}$  is of dimension  $N_{\text{time}}$ ) and  $\mathbf{m}$  for the release rates per time step (i.e.  $N_m$  is reduced to  $N_{\text{time}}$ ). Furthermore, taking into account the improvements described in the previous section, the vector  $\mathbf{x}$ , is  $\{\mathbf{m}, \mathbf{z}, r, \mathbf{c}, b_m, b_c\}$ , with  $N_{\text{var}} = N_{\text{time}} \times 2 + 5$  variables.

Forward modelling, on which the creation of observation operators for sampling emission heights is based, has a high computational cost. Thus, a set of observation operators is pre-computed for an ensemble of heights  $\mathcal{Z}$ . The transition probability of the vector  $\mathbf{z}$  is chosen so that the sampled emission heights lie within the limits of  $\mathcal{Z}$ . For a given emission height state considered during MCMC sampling, the corresponding observation operator is calculated as an interpolation of predetermined observation operators. The interpolation is used to prevent the sampled state from being trapped in a local minimum.

#### 4.1.2.4 Pollution assessment

The aim of these inversion methods is to find the distribution of each vector  $\mathbf{x}$  component. We have seen that this vector contains at least the variables characterising the smoke source in terms of release rate and emission height  $\mathbf{m}$ . We therefore introduce  $\mathbf{y}_p$ , the predicted concentrations using the vector  $\mathbf{m}$  recovered and applied to the dispersion model by the operator  $\mathbf{H}$  (4.6), where  $\mathbf{m}_p$  is the vector for calculating the predictions from the most probable value of the posterior distributions contained in the vector  $\mathbf{m}$ . In the following, the components of  $\mathbf{m}_p$  are either equal to the mean of each distribution in  $\mathbf{m}$  and denoted  $\bar{\mathbf{m}}$ , or equal to the median  $\text{med}(\mathbf{m})$ .

$$\mathbf{y}_p = \mathbf{H}\mathbf{m}_p \quad (4.6)$$

However, the advantage of MCMC is that a distribution can be recovered, allowing the uncertainties to be quantified, but this advantage is forfeited when a single value is extracted from the posterior distributions. To limit the computational costs, we propose to extract the standard deviation  $\sigma_{m_p}$  of these distributions to characterise the uncertainties relative to  $\mathbf{m}_p$ . Thus,  $\mathbf{H}(\mathbf{m}_p - \sigma_{m_p})$  and  $\mathbf{H}(\mathbf{m}_p + \sigma_{m_p})$  form the predictions  $\mathbf{y}_{p-}$  and  $\mathbf{y}_{p+}$  respectively in order to

identify the impact of uncertainties in  $\mathbf{m}$  on the predictions  $\mathbf{y}_p$ . The same principle applies to the  $\mathbf{z}$  vector for height inversion and to the  $\mathbf{c}$  vector for background concentration inversion. Thus, if we consider  $\mathbf{c}_p$  which corresponds to the vector of the most probable value of the posterior distributions contained in the vector  $\mathbf{c}$ , equation (4.6) evolves into (4.7) by considering  $\mathbf{c}$  and  $\mathbf{m}$  independent.

$$\mathbf{y}_{p+} = \mathbf{H}(\mathbf{m}_p + \sigma_{m_p}) + (\mathbf{c}_p + \sigma_{c_p}) \quad (4.7a)$$

$$\mathbf{y}_p = \mathbf{H}\mathbf{m}_p + \mathbf{c}_p \quad (4.7b)$$

$$\mathbf{y}_{p-} = \mathbf{H}(\mathbf{m}_p - \sigma_{m_p}) + (\mathbf{c}_p - \sigma_{c_p}) \quad (4.7c)$$

The resulting hindcasts  $\mathbf{y}_p$  (equations (4.6) and (4.7)) can be compared with the real concentrations measured during the fire. For this purpose, the statistical indicators formulated in Chang and Hanna (2004); Hanna and Chang (2012), generally employed to measure the performance of air quality models, are used in this work. Five statistical indicators are introduced for the study and described in appendix D.2 : the fractional bias FB (equation (D.3a)), the normalised mean square error NMSE (equation (D.3b)), the correlation coefficient R (equation (D.3c)), the normalised absolute difference NAD (equation (D.3d)) and the fraction within a factor of two FAC2 (equation (D.3e)). These statistical indicators are applied to each experiment in this work.

### 4.1.3 Numerical experiments

The inverse method developed in section 4.1.2.1, its improvements presented in section 4.1.2.2, and height inversion proposal from section 4.1.2.3 are applied to the fire case from section 4.1.1.1.

#### 4.1.3.1 Inversion configurations

The MCMC method requires the initialisation of control variables and setting parameters. Prior background concentrations  $\mathbf{c}_b = \{c_{Tb}, c_{Ub}\}$  are parameters fixed respectively on Airparif's annual estimate of  $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for traffic stations and  $15 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for urban stations. The vector  $\mathbf{m}_b$  of prior release rates is set to the null vector because of the short operational lead times for estimating it. The initialisation of the smoke source vector  $\mathbf{m}$  is defined as its prior vector. Similarly, if the background concentrations  $\mathbf{c} = \{c_T, c_U\}$  are among the variables of interest to be inverted, the initialisation of these scalars is defined as their prior. The variances  $r$  and  $b_c$  are set to the variance of the observed data  $\sigma_y^2 (\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3})^2$ . Since no prior information is available to quantify  $b_m$ , its value is set to a plausible variance greater than 0, at  $100^2 (\text{kg}\cdot\text{h}^{-1})^2$ . These variance values are fixed, unless they are included in the control variables, in which case they initialise the MCMC simulation.

Forward modelling is based on the information provided in the section 4.1.1.2. To compute the observation operators associated to  $\mathcal{Z}$ , the set of predefined emission heights, two scenarios are simulated. In the first, surface sources are assumed to be at heights of  $\mathcal{Z}$  and in the second, volume sources are assumed to be centred on the heights of  $\mathcal{Z}$  with a vertical extension of 50 m.

Operational time constraints limit the number of simulations that can be carried out to build  $\mathbf{H}$ . Firstly, five emission heights expressed in metres are considered, in :  $\mathcal{Z}_{100:300} = \{100, 150, 200, 250, 300\}$  based on visual observations. This set is used to define a so-called "reference case" and carry out a sensitivity analysis, in sections 4.1.3.2 and 4.1.3.3. In a second

step, the previous set is extended to the set  $\mathcal{Z}_{100:600} = \{100, 150, 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 550, 600\}$  to simulate the lack of prior visual observation of the emission height.

The inverse method of emission height formulated in section 4.1.3.4 is then tested.

The MCMC method provides an estimate of the smoke source  $\mathbf{m}$  and  $\mathbf{z}$  if considered, and its uncertainties for each inversion configuration tabulated in figure 4.3. Beyond the inversion

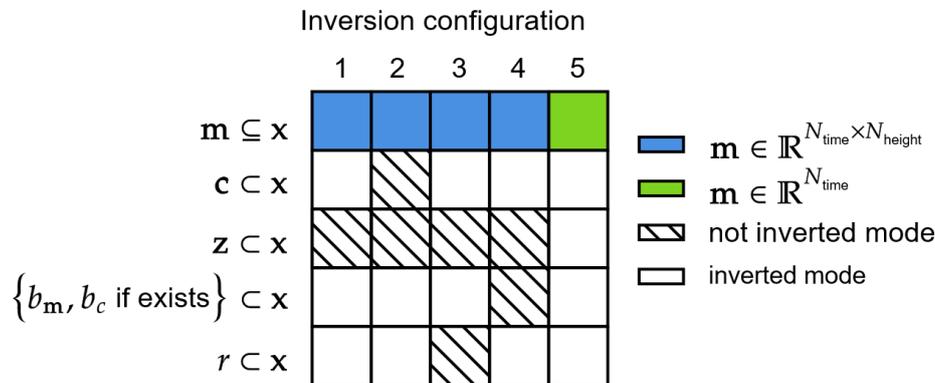


Figure 4.3 – List of presented inversion configurations.

- 1 : reference case
- 2 : reference case w/o background concentrations inversion
- 3 : reference case w/o model error inversion
- 4 : reference case w/o prior error inversion
- 5 : w emission height inversion

configuration, three direct modelling profiles A, B and C are tested. Profiles A and B are defined with the same  $\mathcal{Z}$  set but use volume source and surface source respectively. A and C use both volume source but a different  $\mathcal{Z}$  set. These profiles are applied to several inversion configurations in figure 4.3. The “reference case”, inversion in configuration 1 of figure 4.3, is defined as the basis for the sensitivity study of inversion improvements presented in the section 4.1.3.3. For all these inversion configurations and modelling profiles, the number of unknowns for emission time  $N_{\text{time}}$  is set to 5 to cover the five hours  $T_i, i = \{0, 1, 2, 3, 4\}$  of the fire from its start to its drowning.  $T_0$  represents the first hour of the fire since it started at 03 :30 UTC and  $T_4$  represents the last hour of the fire before the end of smoldering at around 08 :30 UTC. The number of unknowns for the emission height is defined by  $N_{\text{height}} = \text{Card}(\mathcal{Z})$  and depends on the set  $\mathcal{Z}$  considered in profiles A/B and C.

Predictions and observations are compared using statistical indicators presented in section 4.1.2.4 to assess the performance of the inversion configurations and modelling profiles tested. Table 4.1 summarises the indicator values obtained for the different studies. In addition, the distribution of costs resulting from the  $\mathcal{J}$  function is studied to support the evaluation of inversion configurations, in particular by characterising the impact on costs of adding certain variables to the inversion.

The cases 1–A and 1–B are examined in section 4.1.3.2 to assess the impact of a volume source compared with a surface source. The “reference case”, 1–A, take into account all the improvements of the inverse system, for comparison with results : without inversion of background concentrations (2–A), without retrieval of model error (3–A), and without retrieval of prior error (4–A). Cases 1–C and 5–C are examined in section 4.1.3.4, for an in-depth analysis of the emission heights inversion.

Table 4.1 – Statistical indicators for the different inversion configuration investigated. The case numbers correspond to the inversion configuration outlined in figure 4.3. A, B and C are direct modelling profiles considered for the tests :

A :  $\mathcal{Z}_{100:300}$  & volume source

B :  $\mathcal{Z}_{100:300}$  & surface source

C :  $\mathcal{Z}_{100:600}$  & volume source

cases	inversion configuration	- profile	FAC2	FB	NMSE	NAD	R
	1	A	0.86	0.05	0.17	0.17	0.75
	1	B	0.85	0.05	0.17	0.17	0.74
	1	C	0.82	0.05	0.20	0.18	0.72
	2	A	0.24	0.72	1.33	0.48	0.56
	3	A	0.82	0.05	0.20	0.18	0.72
	4	A	0.86	0.04	0.17	0.17	0.75
	5	C	0.88	0.12	0.16	0.15	0.78

#### 4.1.3.2 Reference case

The “reference case” analysed in this section corresponds to the case 1–A, where  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}, r, \mathbf{c}, b_m, b_c\}$  with  $N_{\text{var}}$  of dimension  $N_m + 5$  with  $N_m = N_{\text{height}} \times N_{\text{time}} = 25$ . Some of the distributions retrieved are depicted in figure 4.4 : the distributions of  $\mathbf{m}$  and  $\mathbf{c}$  are reported on the left and right panels respectively. Figure 4.4a describes the smoke source mean vector  $\bar{\mathbf{m}}$  and associated standard deviation  $\sigma_m$ , providing an overview of the release rate retrieved for each emission height considered in  $\mathcal{Z}_{100:300}$  and for each emission time  $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ . The cumulative mean values obtained per time step were also calculated (in red).

The maximum amount of mass emitted in one hour is around  $2\,500 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  for all heights considered per time step. Looking at the standard deviations transcribed in figure 4.4a, the uncertainties are not negligible for all emission heights with mean release rates greater at higher heights. The cumulative average release rate varies over time, with a peak during the second and third hours of the fire, in line with the fire brigade’s observations : the maximum rate is observed during the predominant hours of the fire’s full development phase.

Another area of interest is the reconstruction of background concentrations by station type. The corresponding posterior distributions  $\mathbf{c}$  reconstructed using the MCMC method are presented in figure 4.4b. The mean values of background concentration are  $\bar{c}_U = 22 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for urban stations and  $\bar{c}_T = 34 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for traffic stations, with standard deviations of  $\sigma_{c_U} = 4 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  and  $\sigma_{c_T} = 6 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ , respectively. The orders of magnitude match those of the stations not affected by the plume. Indeed, three traffic stations not located in the trajectory of the plume were identified with temporal background concentration values of  $52 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ,  $45 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  and  $39 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for the fire duration. The background concentration estimated for traffic-type stations using our retrievals is closer to the average of these three values ( $= 45 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ) than AirParif’s usual estimate ( $= 20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ). The inversion of background concentrations appears to be consistent.

Figure 4.5 compares the retrieved concentrations, as functions of the mean vectors  $\bar{\mathbf{m}}$  and  $\bar{\mathbf{c}}$  extracted from posterior distributions, to the real observations. In addition, the uncertainties of the concentrations obtained from the standard deviations  $\sigma_m$  and  $\sigma_c$  of the distributions are represented by the red bars. The limits of FAC2 indicator are also shown in this figure. The statistical indicators of case 1–A are reported in table 4.1. Overall, 86% of the values are in FAC2, with high concentrations due to the smoke source  $\bar{\mathbf{m}}$ . It is also noticeable that most of

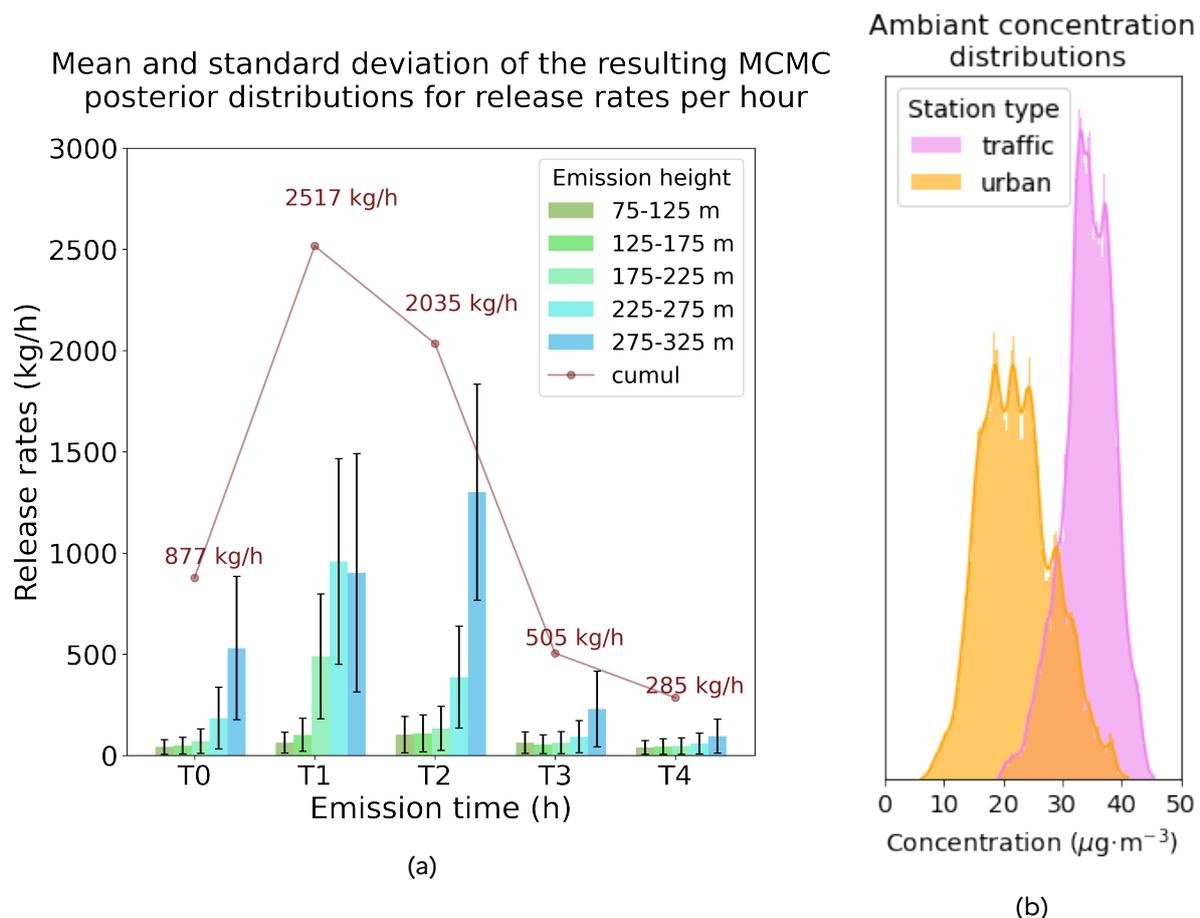


Figure 4.4 – Case 1–A. (4.4a) Means of the posterior distributions obtained for the emission rate  $m$  (in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the five predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations  $\sigma_m$  in black. (4.4b) Posterior distribution of the background concentrations in  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  during the fire.

the concentrations are low and close to the values attributed to background concentrations  $\bar{c}$ . The latter are therefore important to take into account, particularly in the inverse system to enable calibration on observations not located in the smoke plume trajectory. The accumulation of values on the lines representing average background concentrations by type of station shows the limits of our background concentrations representation. The choice of a distinction solely by type of station and very probably the choice of constant background concentrations over time may have led to this result. The uncertainties of the pollutant source, represented through the bars on the predictions in figure 4.5 as  $y_{p-}$  and  $y_{p+}$ , have a variability that appears to keep most estimates within the limits of FAC2.

Moreover, an analysis is performed to assess the impact of a volume source compared to a surface source. Indicator results for this test, presented in the table 4.1, show that cases 1–B and 1–A are very similar. In terms of distribution results, there are also tangible similarities between the two cases. Configuring the source as a “volume” offers a very slight overall improvement of the statistical indicators. In the following, a volume source is hence employed.

### 4.1.3.3 Sensitivity study

#### — Background concentrations

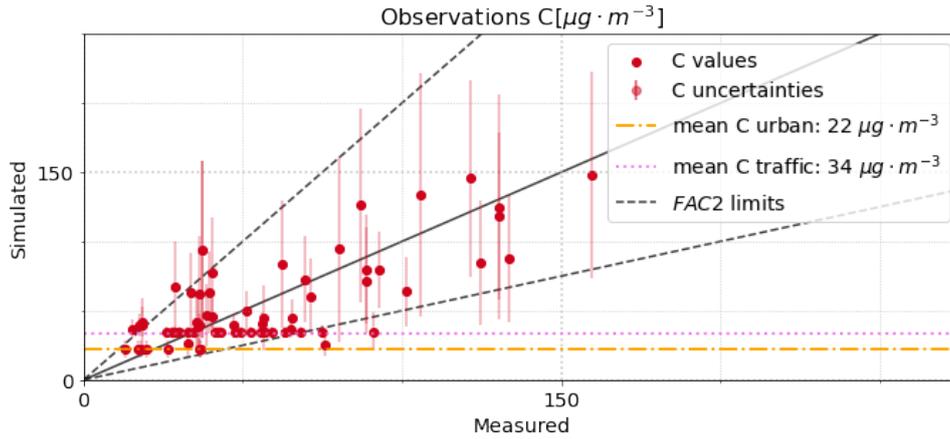


Figure 4.5 – Case 1–A. Concentrations reconstructed using the mean of  $m$  distributions versus the measured concentrations and uncertainties reconstructed using the standard deviation of the distributions; mean background pollution concentrations by type of station; FAC2 boundaries.

We perform a sensitivity analysis to the inversion of background concentrations. The reference case (1–A), which takes background concentrations into account in the inversion, is compared with the case 2–A which does not, by considering the measured concentrations coming exclusively from the fire.

Figure 4.6, depicting the smoke source release rates as the mean  $\bar{m}$  and standard deviation  $\sigma_m$  of the posterior distributions for case 2–A shows that the recovered mass is almost halved compared to the reference case. Although the system tends to be more evenly distributed than in the reference case over all heights and time steps, the maximum mass emitted (figure 4.6) corresponds consistently to the second and third time steps. In contrast to the differences in release rates, the standard deviations of the distributions with respect to their means are similar in this case (black bars in figure 4.6) and the reference case 1–A.

The retrieved concentrations for case 2–A are compared to the observations using statistical indicators. The scores of the case 2–A, displayed in table 4.1, are markedly worse than those of the reference case that appears more reliable.

The configuration used for this test case includes the diagonal values of the covariance matrices  $R$  and  $B$  as inverted variables. As a result, the model error  $r$  doubles and the prior error  $b$  falls to 0. The average overall cost is similar in this case (2–A) and in the reference case (1–A), but the cost associated with likelihood, already predominant (75%) in the reference case, increases by around 15% in case 2–A. A plausible explanation to this latter point could be linked to the fact that some monitoring stations are not affected by the direct simulation and yet have positive measurements due to background concentrations. As a result, the difference between simulation results and actual observations is sometimes equal to a minimum value corresponding to background concentrations. These values, not negligible given the orders of magnitude of the concentrations manipulated, yield a strong model error bias. In the following, background concentrations are systematically considered as control variables.

— **Prior and model error**

The covariance matrices parametrising the likelihood and prior distributions play an important role in the minimisation. A sensitivity study to the inclusion of the variances

Mean and standard deviation of the resulting MCMC posterior distributions for release rates per hour

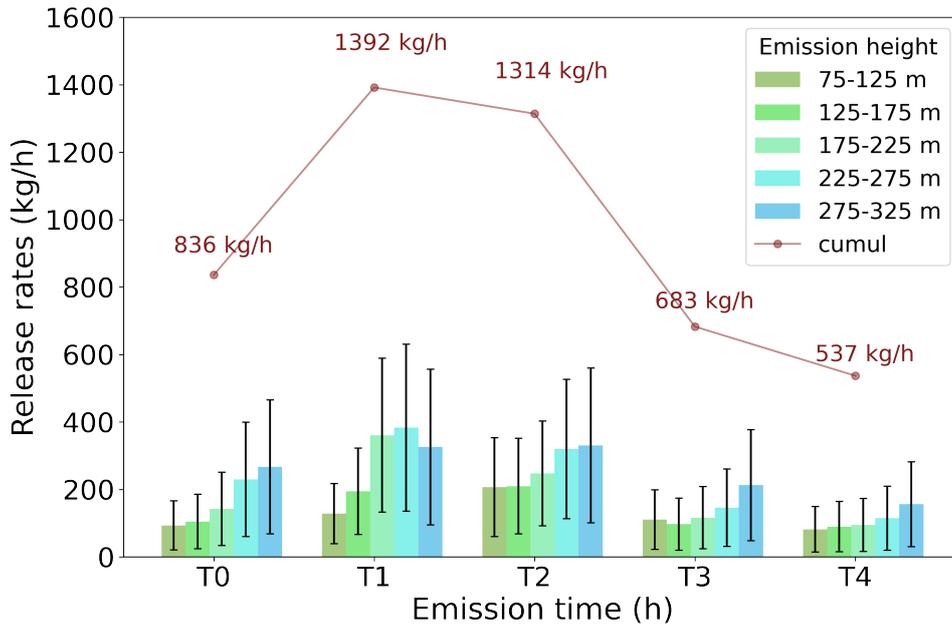


Figure 4.6 – Case 2–A. Means of the posterior distributions obtained for the emission rate  $\mathbf{m}$  (in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the five predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations  $\sigma_m$  in black.

related to  $\mathbf{R}$  and  $\mathbf{B}$  matrices (introduced in section 4.1.2.2) as sampled variables by the MCMC method is carried out in this section. The cases 3–A and 4–A correspond to the same inversion configuration as the reference case but without the inversion of  $r$  ( $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}, \mathbf{c}, b_m, b_c\}$ ) and the inversion of  $\{b_m, b_c\}$  ( $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}, \mathbf{c}, r\}$ ), representing the diagonal scalars of the matrices, respectively.

The resulting statistical indicators (deemed in table 4.1) show very slight variations, considered negligible, between cases 1–A, 3–A and 4–A, by the similarity of their mean vectors  $\bar{\mathbf{m}}$  representing the smoke source. Table 4.2 summarises the mean values  $\bar{\mathbf{m}}$  found and the standard deviations  $\sigma_m$  associated with the smoke source term distributions for each case. The table also displays the mean values  $\bar{\mathbf{c}}$  and uncertainties  $\sigma_c$  found for the background concentrations as well as for the variables  $b_m, b_c$  and  $r$  sampled or not in this section. The orders of magnitude found for  $\bar{\mathbf{m}}$  and  $\sigma_m$  in each case are similar. Case 4–A is closer to case 1–A than to case 3–A, although the differences are not significant. Considering the square roots of the variances, the differences in  $r$  between cases 1–A and 3–A are greater than the differences in  $b_m$  and  $b_c$  between cases 1–A and 4–A.

The main finding is that the initialisation value used for  $b$  seems to be more accurate than the initialisation for  $r$ . Overall, although the statistical indicators are similar or even slightly better for the fractional bias when  $b$  is not taken into account in the inversion (case 4–A), the inclusion of  $r$  and  $b$  in the inversion eliminates the need to assign them a reliable fixed value besides the initialisation.

Table 4.2 – Means and standard deviations results from posterior distributions  $\mathbf{m}$  in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$  and  $\mathbf{c}$  in  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ; for each time  $T_i, i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ ; mean square root results and their associated standard deviation for  $r$  and  $b_m$  in  $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  and  $b_m$  in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$

	cases		
	1-A	3-A	4-A
$\bar{\mathbf{m}}_{T_0} \pm \sigma_{\mathbf{m}T_0}$	903 ± 667	982 ± 753	878 ± 662
$\bar{\mathbf{m}}_{T_1} \pm \sigma_{\mathbf{m}T_1}$	2530 ± 1569	2551 ± 1603	2499 ± 1514
$\bar{\mathbf{m}}_{T_2} \pm \sigma_{\mathbf{m}T_2}$	2031 ± 1122	1942 ± 1217	2014 ± 1082
$\bar{\mathbf{m}}_{T_3} \pm \sigma_{\mathbf{m}T_3}$	526 ± 440	606 ± 512	525 ± 442
$\bar{\mathbf{m}}_{T_4} \pm \sigma_{\mathbf{m}T_4}$	306 ± 268	379 ± 332	303 ± 266
$\bar{c}_T \pm \sigma_{c_T}$	34 ± 4	34 ± 5	35 ± 4
$\bar{c}_U \pm \sigma_{c_U}$	22 ± 6	19 ± 7	24 ± 6
$\sqrt{r} \pm \sigma_{\sqrt{r}}$	24 ± 2	33	25 ± 2
$\sqrt{b_m} \pm \sigma_{\sqrt{b_m}}$	8 ± 1	12 ± 1	3.16
$\sqrt{b_c} \pm \sigma_{\sqrt{b_c}}$	35 ± 1	32 ± 4	33

#### 4.1.3.4 Emission height retrieval

Until now the study focused on sampling the release rates given emission heights defined in the set  $\mathcal{Z}_{100:300}$ . This set was established on the basis of visual observations in the field. In the following section 4.1.3.4 the reference inversion configuration is extended to be applied with the set of heights  $\mathcal{Z}_{100:600}$ . The related case 1-C will be compared to the reference case 1-A to emphasise the role of the information on the range of credible emission heights used in the reference case. Next, in section 4.1.3.4, the inclusion of the emission height inversion into the MCMC method will be studied. The corresponding case 5-C uses the set of heights  $\mathcal{Z}_{100:600}$  as well.

- **Towards emission height discrimination** The question arises as to whether the predefined set of emission heights  $\mathcal{Z}$ , used to calculate the set of observation operators, influences the smoke source recovered : what happens in the case where no zone of effective emission height, after plume rise, has been visually deduced? In the case 1-C, inversion is carried out using the same configuration as the reference case :  $\mathbf{x} = \{\mathbf{m}, \mathbf{c}, r, b_m, b_c\}$ , but with  $N_m = 55$ , having  $N_{\text{height}} = \text{Card}(\mathcal{Z}_{100:600})$ .

The statistical indicator scores obtained for the case 1-C are close to those of the reference case 1-A (see table 4.1). In fact, the predictions, obtained from the mean of the posterior distributions found  $\bar{\mathbf{m}}$ , are similar in both cases. Nevertheless, the mean vectors  $\bar{\mathbf{m}}$  obtained in the two cases are different. The figure 4.7 describes the smoke source  $\bar{\mathbf{m}}$  and  $\sigma_m$  retrieved for case 1-C. The cumulative release rates appear to be much higher than for the reference case.

The posterior distributions of the release rates  $\mathbf{m}$  according to the different emission heights for the emission time  $T_4$  are shown in figure 4.8a to support the analysis of this case results. The distributions for emission heights above 300 m are flatter than the others, indicating a higher degree of uncertainty and explaining the overall high mean release rates.

For further analysis, the concentration obtained at the station located at "Avenue des champs Elysées", using the mean  $\bar{\mathbf{m}}$  of release rates and the mean  $\bar{c}$  of background concentrations, is also introduced in figure 4.8b. It shows the different contributions of each mean value contained in the vector  $\bar{\mathbf{m}}$  and the mean value  $\bar{c}_T$  to the predic-

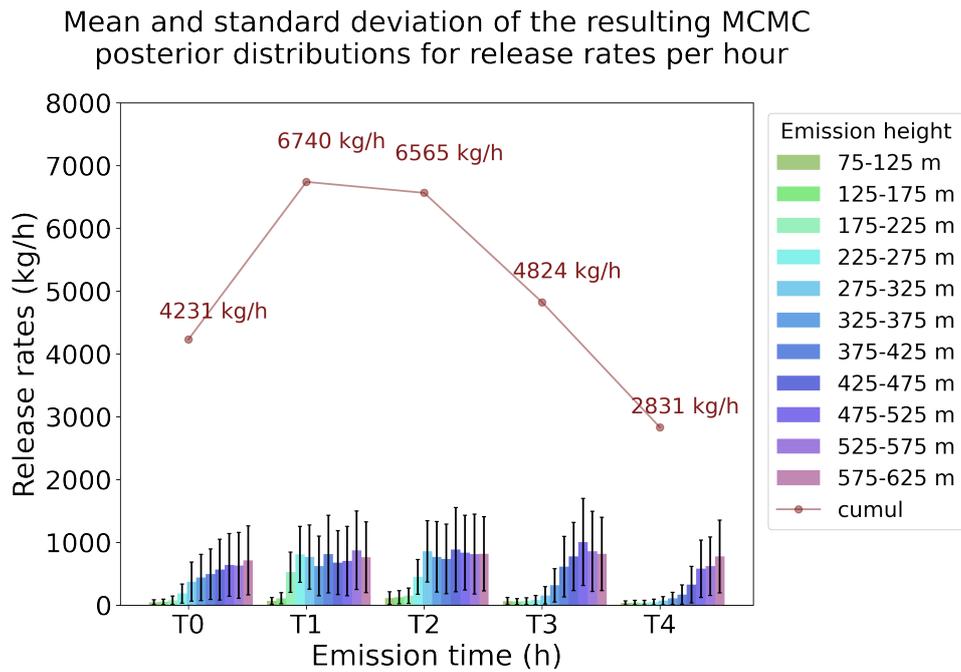


Figure 4.7 – Means of the posterior distributions ( $\bar{m}$ ) obtained for the release rates (in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the eleven predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations  $\sigma_m$  in black.

ted concentration. It can be seen that the high average values of release rates found at heights above 300 m have little impact on the overall concentration. Also, the mean values corresponding to emission heights above 300 m mainly contribute to the reconstruction of the concentration at this station for the last hour between 08 :00 and 09 :00 UTC.

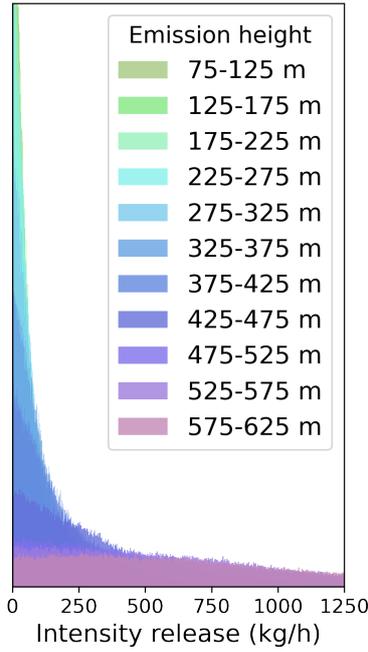
The average background concentrations  $\bar{c}$  obtained are equal to  $30 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for traffic and  $16 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for urban station for this case. These values are lower than those obtained in the reference case 1–A. For "Avenue des Champs Élysées" station, the last hour of emission showed a concentration of  $65 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for the fire day and  $45 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  for the day before the fire with similar meteorological conditions. The most likely explanation is that the fire was in its decline phase at around 06 :30 UTC, contained at 07 :30 UTC, and that the pollution as seen on the observations between 07 :00 and 08 :00 UTC is mainly due to background concentrations. Due to their poor parameterisation, chosen to be constant over time, and the lack of constraints on the emissions heights, the background concentrations retrieved appear to be underestimated and compensated for, during the last two hours of the fire, by emission rates from heights greater than 300 m.

In addition, the distributions over the heights greater than 300 m are not clustered around the value of 0. This means that the system is unable to discard these new heights as a solution, preferring instead to extend the uncertainties.

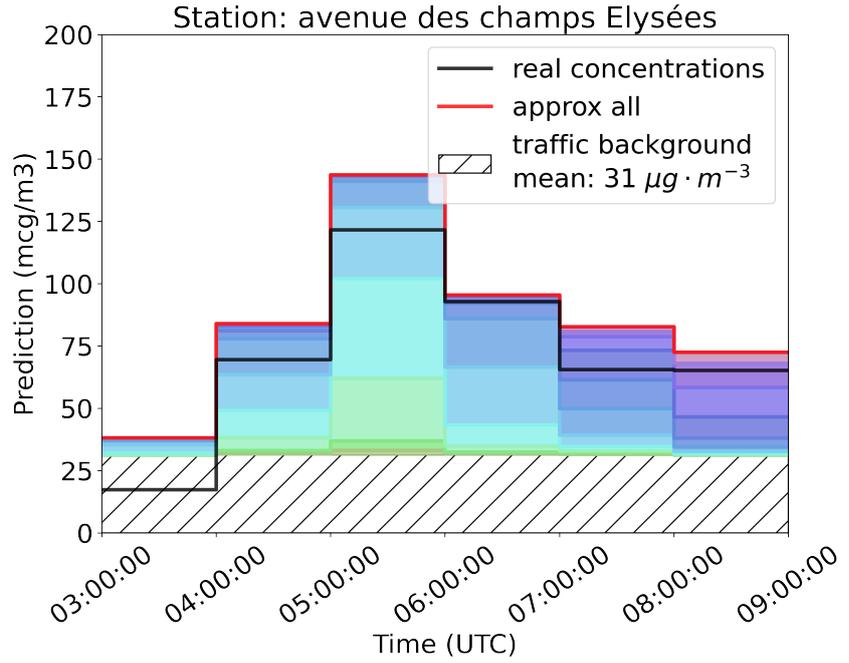
The manner the inversion tends to distribute the emitted mass over the emission heights can be explained by studying the Jacobian  $\mathbf{H}$  matrix, where some stations are impacted, albeit very slightly, by these times and heights (figure 4.9).

Part of the Jacobian matrix  $\mathbf{H}$  corresponding to the "Avenue des champs élysées" station located 7.3 km from the source is extracted (figure 4.9). For  $\mathbf{H}$  of dimension  $N_{\text{obs}} \times N_{\text{var}}$ ,

MCMC distribution for  $\mathbf{m}$  at  $T_4$



(a)



(b)

Figure 4.8 – (4.8a) Release rates  $\mathbf{m}$  marginal posterior distribution in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$  at time  $T_4$  for each height in  $\mathcal{Z}_{100:600}$ . (4.8b) Concentrations contribution reconstructed at the traffic station “Avenue des champs Élysées” from the distributions mean ( $\bar{\mathbf{m}}$ ) at all times  $T_i, i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ ; observations in black; total recovered concentration in red. The colours are shared for figures a and b.

an extracted row corresponds to a specific observation and all the columns correspond to all emission height considered in  $\mathcal{Z}_{100:600}$  for a specific emission time. The last hour of “Avenue des champs Elysées” station (between 08 :00 and 09 :00 UTC) is represented when emission occurs at time  $T_4$  (between 07 :30 and 08 :30 UTC). The values are normalised to the maximum of the  $\mathbf{H}$  coefficients. Release rates at heights greater than

**Period of interest for emission:**  $T_4$

	100m	150m	200m	250m	300m	350m	400m	450m	500m	550m	600m
08 :00 :00	0%	0%	1%	1%	3%	4%	6%	7%	5%	4%	1%
09 :00 :00											

Figure 4.9 –  $\mathbf{H}$  Jacobian matrix extraction for the station “Avenue des champs Elysées” 7.3 km from the source; y-axis : the last hour of the observation, x-axis : emission at time  $T_4$  for each volume height source in  $z$ ; in the squares, the dimensionless coefficients of  $\mathbf{H}$ .

350 m have an impact on the Avenue des Champs Elysées station. This phenomenon is true for most remote stations due to transport dynamics. Observations further away from the source cannot provide discriminating height information because of vertical mixing in the atmospheric boundary layer. Some observations, such as the station on the Avenue des Champs Elysées, suggest significant emissions at heights above 350 m

retrievable from the inversion system. As this suggestion is not a very likely, the system favours the extension of the associated uncertainties for all the fire hours.

With the intention of ensuring that the release rate estimates remain credible even when using the set of emission heights  $\mathcal{Z}_{100:600}$ , the methodology introduced in section 4.1.2.3, which allows the system to identify the most likely emission height per time step, is tested in the next section.

#### — Emission height inversion

Inversion is performed by sampling the emission height  $z$  according to the MCMC methodology. The related case is **5-C**, given the inversion configuration defined as number 5 in figure 4.3 with  $\mathbf{x} = \{z, \mathbf{m}, \mathbf{c}, r, b_m, b_c\}$ ,  $\mathbf{m}, z$  of dimension  $N_{\text{time}} = 5$ , so  $N_{\text{var}} = 15$ . The emission height is sampled in the interval bounded by 100 m and 600 m, corresponding to the minimum and the maximum values of the set  $\mathcal{Z}_{100:600}$ . The posterior distributions of  $z$  and  $\mathbf{m}$  are presented in figure 4.10 on the left (figure 4.10a) and on the right (figure 4.10b) respectively.

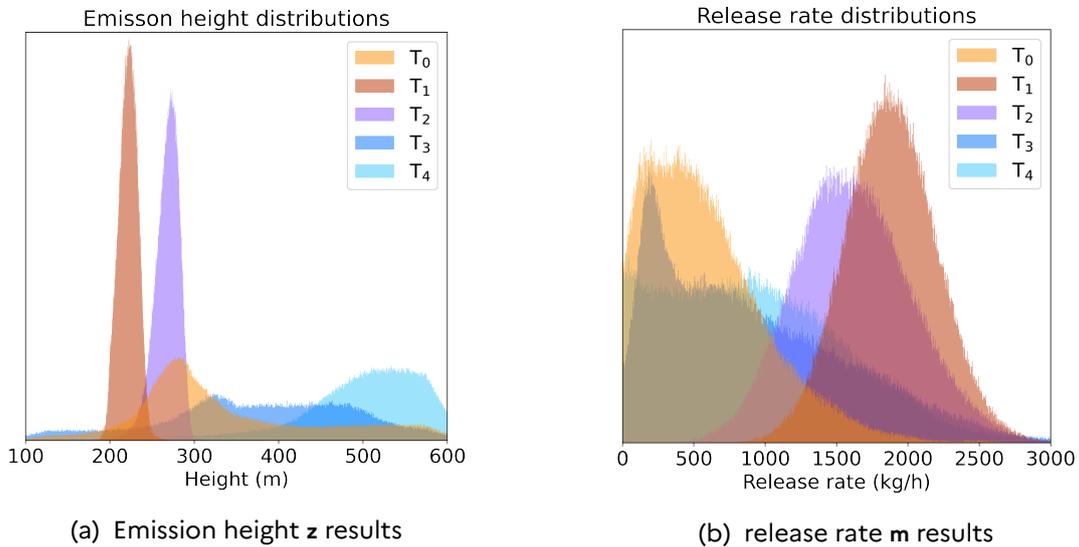


Figure 4.10 – Posterior distributions for (4.10a) the heights (in m) and (4.10b) the release rates (in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ), at the five emission times  $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ .

Table 4.3 summarises the smoke source values : mean  $\bar{\mathbf{m}}$ , median  $\text{med}(\mathbf{m})$  and standard deviations  $\sigma_m$  of  $\mathbf{m}$  posterior distributions as well as for  $z$  retrieved in this case.

Table 4.3 – Means, median and standard deviations results from posterior distributions  $\mathbf{m}$  in  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$  and  $z$  in m; for each time  $T_i, i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$  of case **1-C**.

	Emission times				
	$T_0$	$T_1$	$T_2$	$T_3$	$T_4$
$\bar{\mathbf{m}}$	594	1882	1621	930	947
$\text{med}(\mathbf{m})$	519	1878	1601	799	886
$\sigma_m$	419	322	411	672	624
$\bar{z}$	336	222	267	375	493
$\text{med}(z)$	303	222	269	380	509
$\sigma_z$	108	11	15	111	80

It can be seen that the system always recovers the intensive phase of the fire at times  $T_1$  and  $T_2$  with median values of  $\text{med}(\mathbf{m}_{T_1}) = 1878 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  at  $\text{med}(z_{T_1}) = 222 \text{ m}$  and

$\text{med}(\mathbf{m}_{T_2}) = 1601 \text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  at  $\text{med}(\mathbf{z}_{T_2}) = 269 \text{ m}$ , respectively. This response appears robust since the system also provides low uncertainties associated with the emission height  $\mathbf{z}$  at these times ( $\sigma_{\mathbf{z}_{T_1}} = 11 \text{ m}$  and  $\sigma_{\mathbf{z}_{T_2}} = 15 \text{ m}$ ). In comparison, the distribution of the emission height at  $T_0$  (fire development phase) has a higher variance, indicating that the emission height at  $T_0$  is subject to greater uncertainty. The maximum of the posterior distribution is globally located between 200 m and 350 m.

The mean  $\bar{\mathbf{m}}$  values retrieved for time  $T_0$ ,  $T_1$  and  $T_2$  are consistent with the cumulative mean results of reference case 1–A (results illustrated in figure 4.4). Taking the results of release rates for case 1–A as reference, the median values of case 5–C are -43%, -26% and -22% lower for  $T_0$ ,  $T_1$  and  $T_2$ , respectively. These differences are partly due to the fact that the cumulative release rates over several heights are compared to the release rates over one height.

The results for times  $T_3$  and  $T_4$  are examined next. There are large uncertainties for both emission height and released rates. Due to a lack of constraint from the observations, there is a large number of pairs of values ( $\mathbf{m}, \mathbf{z}$ ) that can be used to reconstruct the observations. This finding is in line with the result put forward in case 1–C concerning the background concentrations potentially mis-estimated by the inversion for these hours of the fire already contained at 07 :30 UTC. The mean concentrations found for this case, equal to their median, are  $\bar{c}_r \pm \sigma_{c_r} = 41 \pm 4 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  and  $\bar{c}_u \pm \sigma_{c_u} = 32 \pm 4 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ . Comparing the value of  $45 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$  (obtained by using three traffic stations not located in the trajectory of the plume in section 4.1.3.3) with the traffic background concentration found in this case (5–C), the difference is lower than in the case 1–A. However, in view of the smoke source results for the last two periods of the fire, the representation of the background concentrations as a temporal constant remains a limitation for the inverse system.

Since the estimation of the posterior distributions for times  $T_3$  and  $T_4$  seems less robust than the estimation for times  $T_0$ ,  $T_1$  and  $T_2$ , the analysis now focuses on these first three emission times. The height inversion methodology applied to this case (5–C) is based on a linear interpolation of the model through  $\mathbf{H}$  matrix. Direct modelling based on the medians of the retrieved posterior distributions is performed next to confirm the results.

The direct modelling is performed with volume sources centred on the medians of the height distributions and the standard deviations  $\sigma_z$  (see table 4.3) are used as the thickness of the source polygons on  $z$  axis expressed in section 4.1.1.2. The medians of the  $\mathbf{m}$  distributions are used as associated release rates. Uncertainties in the form of standard deviations  $\sigma_m$  are used as  $\mathbf{m} \pm \sigma_m$  to quantify the uncertainties in the predictions. The reconstructed smoke source term is described in figure 4.11. Finally, the contribution of background concentrations  $\mathbf{c}$  are also used by extracting mean vector  $\bar{\mathbf{c}}$  and uncertainties associated to the posterior distribution  $\sigma_c$  to reconstruct the total concentrations as introduced in section 4.1.2.4.

The results of the comparison with observations are available in table 4.1 (case 5–C) for the statistical indicators introduced in section 4.1.2.4. With this inversion configuration, the indicators scores are similar to those of the reference case, except for the fractional bias which is slightly lower. The corresponding FAC2 score is represented in figure 4.12. Uncertainties of the smoke source and background concentrations propagated on the predictions (bars in figure 4.12) are low. By reconstructing only the first three hours of fire emission (between 03 :30 and 06 :30 UTC), 88% of the ratio of predictions to observations fall within the limits of the FAC2, as in the reference case. This reinforces the

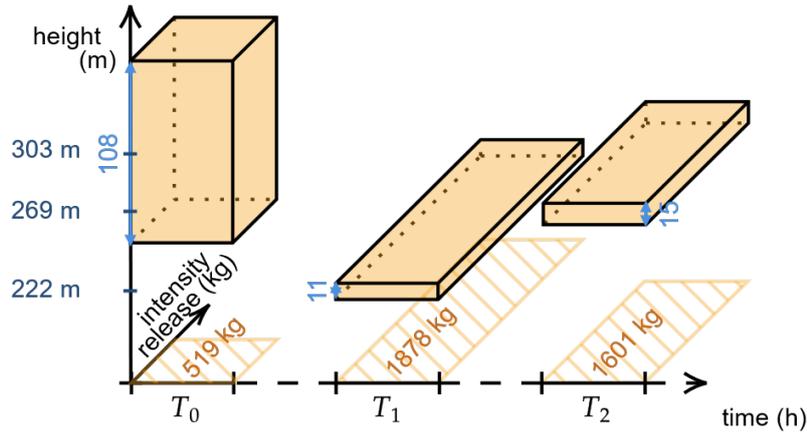


Figure 4.11 – Smoke source term reconstructed for times  $T_i, i = \{0, 1, 2\}$  with  $\text{med}(z_i)$  used for the height and  $\bar{m}_i$  for the release rates.

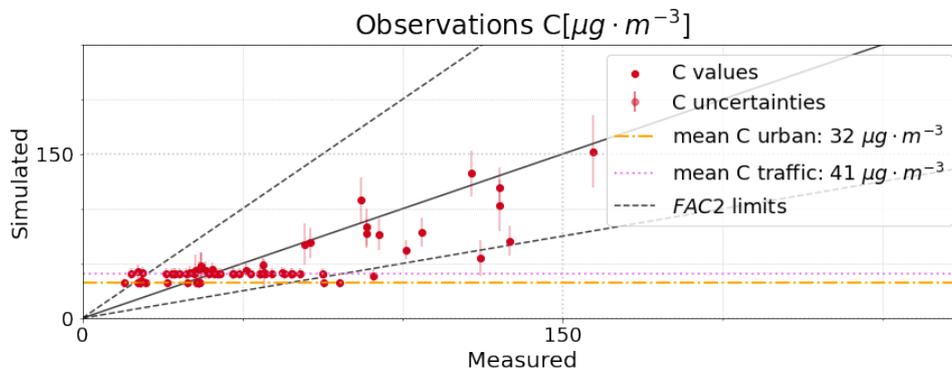


Figure 4.12 – Predictions in red (using the source described in figure 4.11) versus the observations and uncertainties reconstructed using the standard deviation of the distributions; background concentrations mean by type of station; FAC2 boundaries.

hypothesis of a fire already contained for the last two hours of the fire (between 06 :30 and 08 :30 UTC), with negligible emissions. Therefore, this supports the hypothesis of poorly estimated background concentrations, particularly for the last observation time between 08 :00 and 09 :00 UTC.

#### 4.1.4 Conclusions

A Markov Chain Monte Carlo technique based on the Metropolis-Hasting algorithm was implemented to characterise smoke emissions from large-scale fires. It was applied to the real fire of April 16, 2021 in Aubervilliers near Paris. The posterior distributions of different variables describing the source, as the emission height or the release rates, were sampled. We fine-tuned our inversion system to meet operational needs, particularly with regard to the background concentrations that need to be carefully taken into account in the system.

The MCMC method provides release rates consistent with observations of the intensive phase of the fire. Enhancements to our inversion system enabled us to identify background concentrations by type of station and, constant over time. Estimating background concentrations prevents searching for a value, difficult to estimate in an operational situation, to be subtracted from the observations. These estimations are of the same order of magnitude

than annual estimates from AirParif, but even more consistent with the observations out of the plume trajectory. However, these background concentrations, assumed constant over time, do not appear to be well suited for at least the two last hours of the fire. Furthermore, including the variances of covariance matrices as sampled variables alleviate the importance of their initialisation, which is highly useful in operational situations.

Two emission heights parametrisation strategies are studied. The first consists of finding the distributions associated with the release rates for all the predefined emission heights from forward modelling. The second involves inverting the emission height to obtain an associated release intensity. This latter method has the advantage to provide a single emission height per time step, which is generally the way to define a major fire smoke source and is easier to analyse. In some cases, however, there may be several emission heights per time step, hence the advantage of the first strategy.

The two methods are used to identify the intensive phase of the fire and in particular a maximum cumulative release rate over several heights of the order of  $2\ 500\text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  with the first method and  $2000\text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  over one height with the second method. This second approach made it possible to qualify the emission height per time step, which is generally between 250 m and 350 m, in accordance with the visual observations of the firefighters. In the case of a real fire, the MCMC method provides release estimates consistent with the smoke source derived in previous situations (Alp and Michalowicz, 2005; Daly et al., 2012).

The numerical experiments show that our Bayesian method is sensitive to the background concentrations representation in the results of release rate emissions. As a consequence, it could be interesting to consider, as a potential extension of this work, a representation of background concentrations not only by station typology, but also by time step. Another approach to the representation of background concentrations for traffic monitoring stations would be to choose, for example, a usual temporal evolution of regular traffic-related cycles.

Finally, to deal with the case of significant plume rise, for which ground-based measurements would not be capable of capturing the plume, an option to investigate would be to use remote sensing measurements. Spatially integrated measurements from satellite (Petrenko et al., 2017) or ground based lidars (Wang et al., 2013) data, potentially limiting the impact of plume transverse dispersion modelling error, could be helpful. However, this type of data can also be subject to considerable limitations, notably due to limited spatial resolution for satellite data. Another future research direction could be to assimilate field observations at higher spatial resolution, notably via drones (Chen et al., 2023). An observation of the vertical concentration profile should strengthen the inverse system for discriminating emission heights.

## 4.2 Analyse de sensibilité à la vitesse de dépôt sec

Dans cette section, nous nous intéressons à l'impact de la vitesse de dépôt total sur la modélisation de la dispersion atmosphérique des  $\text{PM}_{10}$ . Dans un premier temps, nous étudions la modélisation de la vitesse de dépôt pour les conditions météorologiques du jour de l'incendie. Dans un second temps, nous effectuons une analyse de sensibilité sur plusieurs ordres de grandeur de vitesse de dépôt sur les résultats d'inversion.

### Application du modèle de Zhang

Nous appliquons dans cette section la modélisation de la vitesse de dépôt déjà introduite dans le chapitre 2 (section 2.2.3). Nous avons vu que le processus de dépôt dépend de

la météorologie. Nous exploitons les données météorologiques d'analyse disponibles le jour de l'incendie. On observe un vent faible à modéré entre 0 et 10 m du sol sur la période de l'incendie. La vitesse de frottement moyenne en temps observée est faible et l'atmosphère est neutre sur les premières heures de l'incendie.

Le modèle de dépôt de Zhang (Zhang, 2001) calcule la vitesse de dépôt sec en fonction de la résistance aérodynamique et de la résistance de surface. Plusieurs données sont donc nécessaires :

- la vitesse de friction moyennée en temps  $u^* = 0,35 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  au niveau de la source,
- la longueur de rugosité  $z_0 = 1 \text{ m}$  pour une banlieue (Wieringa, 1981) ou un centre/quartier d'affaire (Stull, 1988),
- la stabilité de l'atmosphère neutre
- les conditions atmosphériques générales (température, pression,...).

Les valeurs de vitesse de dépôt déterminées par le modèle de Zhang sont tracées en fonction du diamètre des particules sur la figure 4.13 (à gauche). La vitesse de dépôt total est tracée en rouge et les vitesses de sédimentation et de diffusion qui la composent en pointillés bleus. La figure de droite illustre les différents processus qui composent la vitesse de diffusion. On

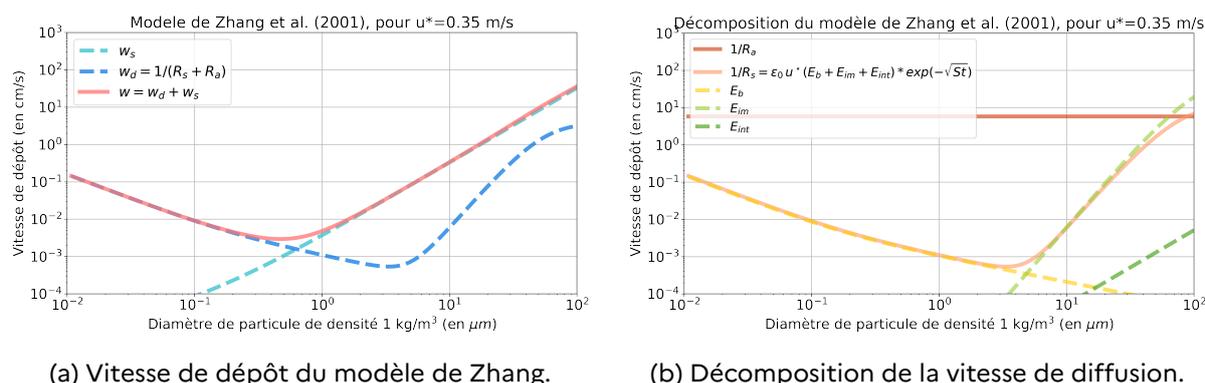


Figure 4.13 – Application du modèle de dépôt de Zhang

remarque que la vitesse de sédimentation contribue à la vitesse de dépôt de manière dominante pour les particules de diamètre supérieur à  $1 \mu\text{m}$  et la vitesse de diffusion est dominante pour les particules de diamètre inférieur à  $1 \mu\text{m}$ . Ensuite, parmi les éléments qui composent la vitesse de diffusion, la résistance aérodynamique est constante en fonction du diamètre de particule considéré, le terme d'impaction  $E_{im}$  qui compose la résistance de surface est effectif pour les particules de diamètre supérieur à  $1 \mu\text{m}$ , le terme d'interception  $E_{int}$  pour les particules de diamètre supérieur à  $10 \mu\text{m}$ , et le terme de diffusion brownienne  $E_b$  pour les particules de diamètre inférieur à  $100 \mu\text{m}$ .

Un diamètre aérodynamique de  $1 \mu\text{m}$  est choisi pour définir les particules dans cette étude (voir section 1.2.1). Pour un diamètre aérodynamique de  $1 \mu\text{m}$ , la stabilité de l'atmosphère n'a pas d'impact sur les résultats de vitesse de dépôt au vue de la faible contribution de la résistance aérodynamique. La hauteur à laquelle la vitesse de dépôt est calculée impacte peu les résultats (Sehmel and Hodgson, 1978) pour ce type de diamètre. Dans les conditions de l'incendie, le modèle de Zhang attribue à ce diamètre une vitesse de dépôt totale de  $w = 0,090 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ , composée de la vitesse de sédimentation  $w_s = 0,004 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$  et de la vitesse de diffusion  $w_d = 0,086 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ .

Nous souhaitons à présent évaluer l'impact de différents ordres de grandeur de la vitesse de dépôt directement sur les résultats d'inversion.

## Étude de sensibilité

La méthode MCMC est utilisée pour analyser l'influence de la vitesse de dépôt sur les résultats inverses. L'application concernée est l'incendie d'Aubervilliers détaillé dans la section 4.1.1 de ce chapitre (dans l'article). Nous considérons le vecteur de contrôle (qui contient les variables à retrouver, voir section 4.1 de l'article)  $\mathbf{x} = \{r, \mathbf{m}\}$ , où  $r$  permet de définir la matrice de covariance liée à l'erreur modèle comme  $\mathbf{R} = r \mathbf{Id} \in \mathbb{R}^{N_{obs} \times N_{obs}}$  et  $\mathbf{m}$  représente les intensités de rejet. Le rejet est défini pour trois hauteurs d'émission et de manière discrète sur la verticale par  $\mathcal{Z} = \{100, 200, 300\}$  (en m). Le paramètre  $r$  est initialisé à la variance  $\mathbf{y}$  ( $33^2 \mu\text{g}^2 \cdot \text{m}^{-6}$ ); le paramètre  $\mathbf{x}$  est initialisé à une grande valeur ( $10 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$ ); le paramètre  $b$  est fixé à la variance entre deux valeurs de différence de  $1 \text{ t} \cdot \text{h}^{-1}$  ( $0,25 \text{ t}^2 \cdot \text{h}^{-2}$ ); et l'estimation préalable à  $0 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$  uniformément. Nous effectuons l'analyse de sensibilité sur les valeurs de  $w_d$  avec la méthode MCMC.

$w_d \text{ (cm} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$\sqrt{r}$	$\mathbf{x} \pm \sigma_{\mathbf{x}}$ à $T_0$	$\mathbf{x} \pm \sigma_{\mathbf{x}}$ à $T_1$	$\mathbf{x} \pm \sigma_{\mathbf{x}}$ à $T_2$	$\mathbf{x} \pm \sigma_{\mathbf{x}}$ à $T_3$	$\mathbf{x} \pm \sigma_{\mathbf{x}}$ à $T_4$
0,5	25	$327 \pm 140$	$456 \pm 223$	$564 \pm 184$	$133 \pm 91$	$49 \pm 49$
0,05	28	$297 \pm 142$	$459 \pm 214$	$514 \pm 189$	$177 \pm 89$	$30 \pm 51$
0,005	26	$297 \pm 135$	$477 \pm 208$	$499 \pm 174$	$142 \pm 85$	$56 \pm 47$

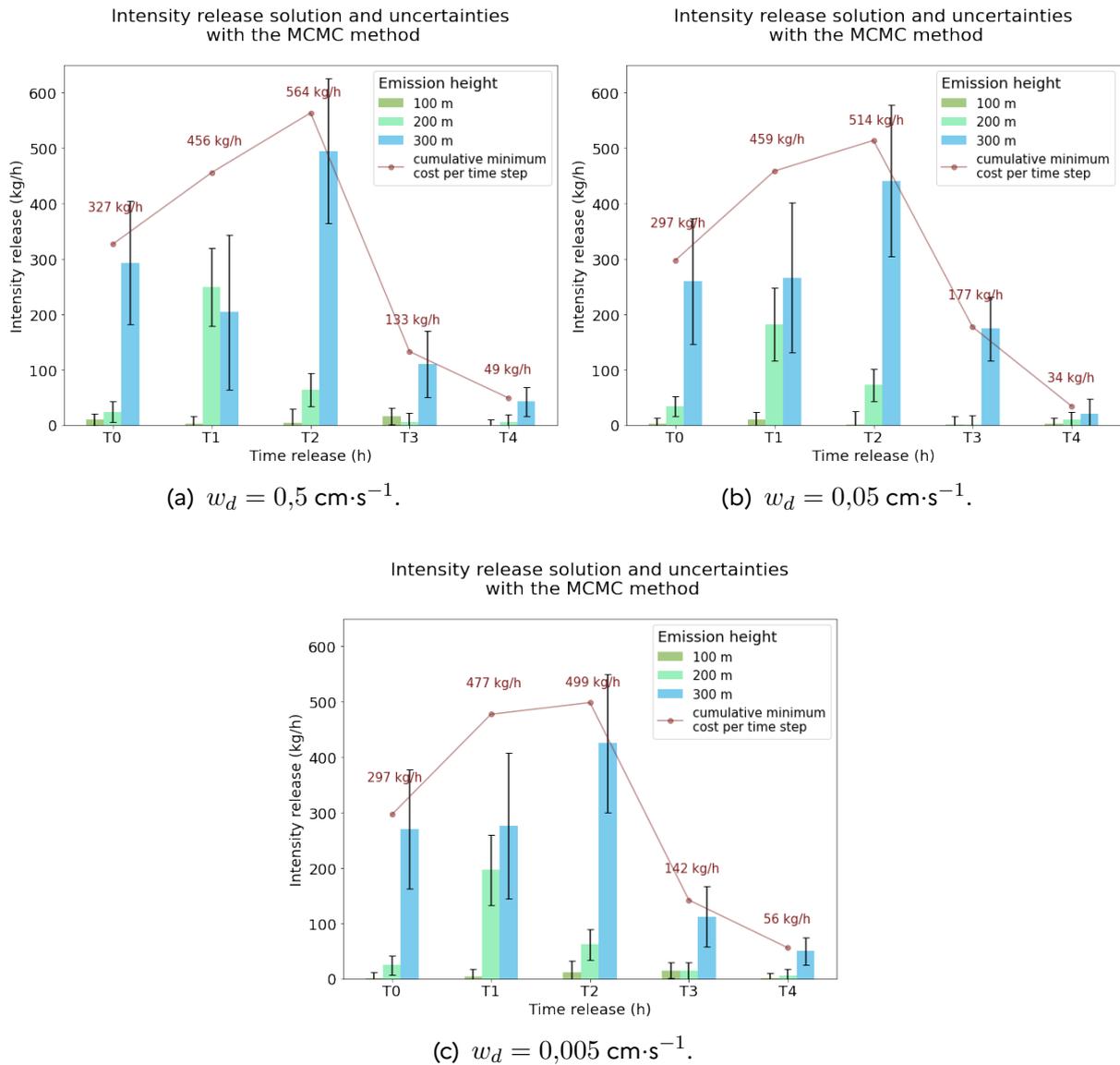
Table 4.4 – Résultats obtenus avec la méthode MCMC. Le paramètre cumulé  $\mathbf{x}$  par hauteur d'émission (en  $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$ ) et le paramètre  $\sqrt{r}$  en  $\mu\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$  sont calculés à partir du coût minimum trouvé; le paramètre  $\sigma_{\mathbf{x}}$  estimé avec les 500 000 derniers états acceptés.

Nous constatons des fluctuations liées au paramètre  $w_d$  entre 1,2 et 11,5% du maximum observé à  $564 \text{ kg} \cdot \text{h}^{-1}$  au temps  $T_2$  (tableau 4.4). Nous notons également que l'écart type  $\sqrt{r}$  trouvé avec le coût minimum ne diffère pas significativement d'un cas à l'autre ce qui signifie que, même avec une matrice  $\mathbf{H}$  différente, les incertitudes ont des poids similaires. Globalement, nous observons que les incertitudes sur les valeurs du débit sont un peu plus faibles pour la vitesse de dépôt  $w_d = 0,005 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ . Les fluctuations de débit cumulées observées (tableau 4.4) sont principalement situées aux temps  $T_2$  et  $T_3$  où l'émission à la hauteur 300 m semble être légèrement sensible à la vitesse de dépôt choisie (figure 4.14).

D'une part, la contribution des émissions cumulées aux hauteurs 200 m et 300 m à l'instant  $T_1$  n'est pas significativement différente d'un cas à l'autre. D'autre part, les contributions des émissions aux hauteurs de 200 m et de 300 m sont différentes au temps  $T_1$  pour le cas où la vitesse de dépôt est la plus élevée. Cela s'explique par le fait que dans cette configuration, la source de hauteur 200 m à  $T_1$  (figure 4.14a) apporte une contribution plus importante à la station la plus proche située à 4 km de la source pour une vitesse de dépôt plus élevée. Dans l'ensemble, pour les trois configurations de  $w_d$ , nous avons tendance à trouver une cinétique similaire de l'incendie. Les résultats (figure 4.14) montrent une évolution temporelle de l'intensité de rejet avec un pic pour la troisième heure de l'incendie, ce qui est cohérent avec l'estimation du terme source : le taux maximum est trouvé dans l'heure prédominante de la phase de développement complet de l'incendie.

Dans ce cas d'incendie réel, la méthode MCMC fournit des estimations de rejet et d'incertitudes peu dépendantes de la vitesse de dépôt pour des particules de diamètre aérody-

Figure 4.14 – Intensité de rejet résultante du MCMC par hauteur d'émission en  $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$  pendant l'incendie.



namique égal à  $1 \mu\text{m}$ .

### 4.3 Analyse des corrélations incendie

Une fois la dynamique temporelle du rejet et la hauteur d'émission estimée par méthode inverse, il devient intéressant d'identifier un ordre de grandeur de taux de production de particules par application des corrélations d'incendies présentées dans le chapitre 1. En complément, les résultats de hauteur d'émission retrouvées par méthode inverse sont utilisés pour évaluer la modélisation de la surhauteur présentée dans la section 1.3.

#### Identification d'un taux de production de suies

Nous avons vu dans le chapitre 1 qu'il existe des corrélations permettant de déterminer le débit de polluant à partir d'un taux de production de polluant, d'une vitesse spécifique de combustion et de la surface en feu par la relation (1.4) reportée ci-dessous :

$$d_p = m'' \tau_{\text{polluant}} S_{\text{feu}}$$

La surface en feu est un paramètre observable. La vitesse spécifique de combustion et le taux de production dépendent du combustible et des conditions de combustion (taille du foyer, ventilation, influence de l'extinction), et ont des incertitudes importantes. Le taux de production  $\tau_{\text{polluant}}$ , communément obtenu expérimentalement à petite échelle, est la donnée avec les incertitudes les plus importantes.

Nous souhaitons, dans cette section, identifier le taux de production de particules de suie à partir du débit d'émission retrouvé par inversion, de la surface en feu et en considérant plusieurs vitesses spécifiques de combustion.

La surface en feu de cet incendie a été estimée à partir des images réalisées par drone de la BSPP, de la cartographie des bâtiments et des informations recueillies auprès des intervenants du LCPP et de la BSPP, en particulier le nombre de lances utilisées au cours du temps et l'heure de feu circonscrit. L'évolution temporelle de la surface en feu a été estimée entre 500 m<sup>2</sup> pour la phase en développement et 2000 m<sup>2</sup> pour la phase pleinement développée de l'incendie. Sans connaissance de la nature précise du stockage de l'entrepôt, nous considérons trois vitesses spécifiques de combustion obtenues pour un faible état de division (cf. section 1.1.2) et correspondant à plusieurs matériaux présents : Polychlorure de vinyle (PVC)/Polyéthylène (PE) bois/carton, et Polyuréthanes (PUR) (FLUMilog, 2011). Les vitesses sont respectivement égales à 0,015 kg·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>, 0,017 kg·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup> et 0,021 kg·m<sup>-2</sup>·s<sup>-1</sup>. Les taux de production de suies retrouvées pour les hypothèses citées sont reportés dans le tableau 4.5. Nous remarquons un taux de production situé entre  $\sim 0,01 - 0,02$  pour les trois vitesses de

$S_{\text{feu}}$ (en m <sup>2</sup> )	$d_p$ (en kg·s <sup>-1</sup> )	Matériaux	$m''$ (en kg·m <sup>-2</sup> ·s <sup>-1</sup> ) à l'état non divisé	$\tau_{\text{polluant}}$ (en g·g <sup>-1</sup> )
2000	0,528	PVC/PE	0,015	0,018
		Bois/carton	0,017	0,016
		PUR	0,021	0,013

Table 4.5 – Taux de production  $\tau_{\text{polluant}}$  retrouvé par l'application de la formule (1.4) avec le débit reconstitué par inversion.

combustion sélectionnés. Ces valeurs sont dans la gamme de taux de production de PM pour des incendies de savane ou de forêt prescrits ( $\sim 0,0166$  g·g<sup>-1</sup> dans Lemieux et al. (2004)). Par ailleurs, la gamme de taux de production retrouvée pour cet incendie est d'un facteur 10 plus faible que pour des incendies pétroliers (Booher and Janke, 1997; Lemieux et al., 2004).

## Évaluation de la hauteur effective

Nous souhaitons à présent comparer la hauteur effective retrouvée par inversion avec la modélisation de la surhauteur de Zonato (Fisher, 2001) décrite dans le chapitre 1. Dans l'article Fisher (2001), la formulation originelle de surhauteur de Zonato est redéfinie en fonction de coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  (4.3) et reproduite ci-dessous :

$$\Delta z_{zo}(x) = d x^a Q_c^b u_{10}^{-c}$$

De plus, la hauteur d'émission au niveau de la source est définie par la relation  $z_s = 0,166 Q_c^{2/5}$  (voir chapitre 1, équation (1.10)).

On détermine dans un premier temps la puissance de l'incendie à partir de la puissance surfacique  $HRRPUA$  et la surface en feu estimée, où  $HRRPUA$  est le produit de la vitesse spécifique de combustion avec la chaleur de combustion. Les valeurs de chaleur de combustion  $\Delta C$  pour les matériaux considérées précédemment sont égales à  $18 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$  pour le PVC/bois/carton, à  $26 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$  pour le PUR et à  $40 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$  pour le PE (FLUMilog, 2011). Les résultats de  $HRRPUA$  et de la puissance totale  $Q_t$  sont reportés dans le tableau 4.6 pour la phase pleinement développée. Ensuite, la puissance convectée est obtenue par l'intermé-

Matériaux	$m''$ (en $\text{kg}\cdot\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ )	$\Delta C''$ (en $\text{MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ )	$HRRPUA$ (en $\text{MW}\cdot\text{m}^{-2}$ )	$S_{\text{feu}}$ (en $\text{m}^2$ )	$Q_t$ (en MW)
PVC	0,015	18	0,27	2000	540
Bois/carton	0,017	18	0,306		612
PUR	0,021	26	0,546		1092
PE	0,015	40	0,6		1200

Table 4.6 – Puissance  $HRRPUA$  calculée en fonction de matériaux et puissances thermiques totale résultantes en fonction de la surface en feu estimée.

diaire de la relation (1.2) avec  $\alpha_c = 2/3$ . Les quatre puissances convectées sont considérées en donnée d'entrée de la modélisation de la hauteur  $z_s$ . Il en résulte une hauteur d'émission  $z_s$  de 28 m pour le PVC, de 29 m pour le bois/carton, de 37 m pour le PUR, et de 38 m pour le PE. La puissance convectée est également utilisée pour la modélisation de la surhauteur  $\Delta z_0$  de (Zonato et al., 1993), ainsi que le diamètre équivalent de la surface en feu  $D_{\text{feu}} = 50 \text{ m}$ , et la valeur de vent à 10 m  $u_{10} = 3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  lors de la phase intensive de l'incendie.

Le document Fisher (2001) propose des ajustements des coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , et  $d$  de la formule de Zonato et al. (1993) à partir de données expérimentales issues d'incendies de cuves (ou *pool fire*) d'un diamètre de 1 et de 15 mètres avec du kérosène. La formulation du modèle de Zonato modifié par Fisher (2001) a été utilisée pour la modélisation de la surhauteur d'un important incendie de site pétrolier en 2005. Une surhauteur de 1700 m à partir de 15 km de la source dans la direction du vent a été évaluée sur la base d'un  $HRRPUA$  de  $1 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}$  et d'un diamètre de cuve de 40 m (Argyropoulos et al., 2010; Vautard et al., 2007).

La hauteur finale modélisée à l'aide de la surhauteur de Zonato et al. (1993) et de  $z_s$  est illustrée dans la figure 4.15 en phase intensive de l'incendie pour les puissances thermiques considérées. Les résultats de hauteur finale atteinte par le panache retrouvée par méthode inverses sont reportés sur la zone grise pour la même phase. Les résultats de surhauteur obtenus avec les coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  issus de Zonato et al. (1993) sont illustrés sur la figure de gauche et les résultats obtenus avec les coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  moyens de Fisher (2001) sur la figure de droite. Les valeurs des coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  et  $d$  utilisés sont reportés dans le tableau 4.7 (ligne 1 et 2). Nous remarquons que la hauteur finale atteinte est globalement située entre 800 et 1300 m pour les deux cas. La surhauteur est systématiquement surestimée pour toutes

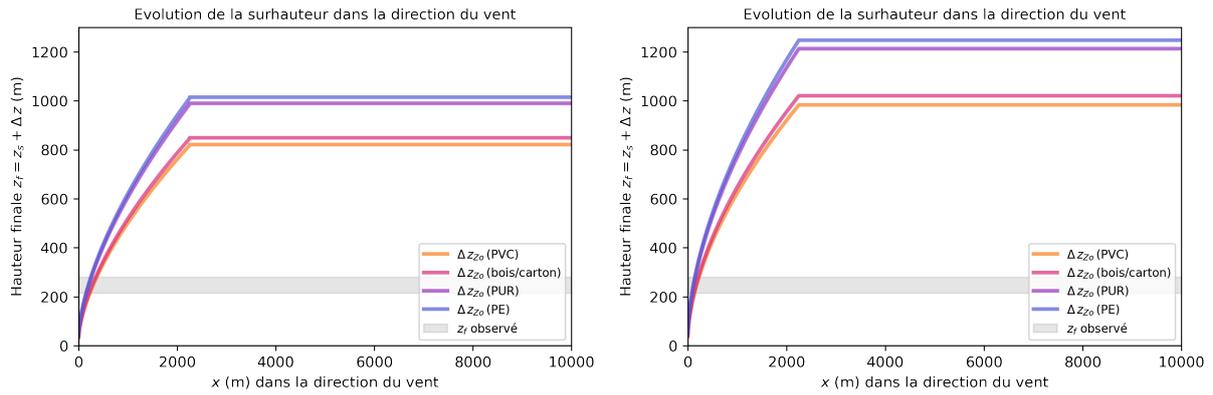


Figure 4.15 – Résultat d’application de la surhauteur de Zonato  $\Delta z_0$  et de la formulation de la hauteur de source  $z_s$  pour les puissances thermiques considérées. Les résultats obtenus avec les coefficients  $a, b, c$  et  $d$  de Zonato et al. (1993) (à gauche) et les résultats obtenus avec les coefficients  $a, b, c$  et  $d$  moyens de Fisher (2001) (à droite). Les résultats inverses sur la hauteur finale atteinte par le panache sont reportés sur la zone grise pour la phase intensive de l’incendie.

le puissances thermiques considérées par rapport au résultat de hauteur finale retrouvée par inversion.

Nous effectuons une régression linéaire multiple des coefficients pour faire coïncider la formule de Zonato modifiée par Fisher aux résultats inverses de hauteur moyenne  $\pm$  l’écart-type de la distribution de hauteur estimée par inversion :  $250 \text{ m} \pm 35 \text{ m}$ . Les coefficients obtenus en fonction des différentes puissances thermiques sont reportés dans le tableau 4.7. Les coefficients ajustés coïncident avec la variabilité des coefficients proposés par (Fisher,

	$a$	$b$	$c$	$d$
Zonato et al. (1993)	0,63	0,26	0,5	0,38
Zonato Fisher (2001)	0,527 – 0,637	0,175 – 0,398	0,575 – 0,849	0,283 – 1,020
$Q_t = 540 \text{ MW}$ (PVC)	0,527 – 0,637	0,175 – 0,271	0,575 – 0,849	0,283 – 0,993
$Q_t = 612 \text{ MW}$ (bois/carton)	0,527 – 0,637	0,175 – 0,256	0,575 – 0,849	0,283 – 0,843
$Q_t = 1092 \text{ MW}$ (PUR)	0,527 – 0,637	0,175 – 0,256	0,575 – 0,849	0,283 – 0,843
$Q_t = 1200 \text{ MW}$ (PE)	0,527 – 0,637	0,175 – 0,254	0,575 – 0,849	0,283 – 0,843

Table 4.7 – Coefficients  $a, b, c$  et  $d$  pour le modèle de surhauteur de Zonato et al. (1993) : valeurs originelles de Zonato et al. (1993), valeurs étudiées par Fisher (2001), et valeurs retrouvées dans ces travaux par régression linéaire multiple pour différentes puissances thermiques.

2001). La valeur moyenne du coefficient  $b$  obtenue par Fisher (0,2865) et la valeur de Zonato, dans une moindre mesure (0,26), impliquent une surestimation systématique de la surhauteur sous les conditions précédemment évoquées pour une puissance totale supérieure ou égale à 1200 MW.

La médiane des coefficients en commun des puissances considérées ( $540 \text{ MW} \leq Q_t \leq 1200 \text{ MW}$ ) permet de définir la relation (4.8) avec le critère d’arrêt  $x_f = 45 D_{\text{feu}}$

$$\Delta z_{z_0}(x) = 0,443 x^{0,562} Q_c^{0,199} u_{10}^{-0,731}. \quad (4.8)$$

Ces coefficients permettent d’obtenir les surhauteurs de 194 m, 199 m, 223 m et 227 m avec des hauteurs d’émission de  $z_s = 28 \text{ m}$  à  $38 \text{ m}$  pour les puissances thermiques prises en compte.

La gamme globale des valeurs de hauteur finale obtenue est par conséquent entre 222 m et 265 m et est incluse dans la gamme des hauteurs effectives obtenues par méthode inverse entre 215 m et 285 m.

Une évaluation du taux de production des particules de suie a été effectuée sur la base du débit retrouvé par inversion et d'une estimation de la surface de l'incendie en fonction d'images prises par un drone. Par ailleurs, des ajustements des coefficients de la formule de Zonato sur la base de reformulations effectuées par Fisher ont permis de retrouver des résultats de surhauteur qui coïncident avec les résultats de hauteur effective obtenus par inversion.

# Conclusions et perspectives

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la recherche d'un système permettant la quantification spatiale et temporelle de substances toxiques issues d'incendies urbains de grande ampleur. Un outil de modélisation inverse a été proposé pour surmonter les défis de la caractérisation de l'émission polluante, en particulier en situation opérationnelle. La combinaison de la modélisation de la dispersion atmosphérique avec des mesures effectuées sur le terrain permet, par modélisation inverse, de reconstituer les caractéristiques associées au rejet de fumées d'incendies, et ainsi d'évaluer leur impact sanitaire et environnemental. Une spécificité de notre approche a été de considérer ces trois thématiques, la modélisation des fumées par l'incendie, la modélisation de la dispersion atmosphérique, et la modélisation inverse, conjointement et d'adapter la recherche scientifique en fonction du besoin opérationnel exprimé.



Un état de l'art a dans un premier temps été effectué sur la corrélation entre incendie et production de fumée dans le chapitre 1. Cette étude a permis de déterminer les caractéristiques du rejet de fumée à partir des caractéristiques thermocinétiques de l'incendie. Il en résulte que la source est composée par le débit de polluants et par la hauteur effective d'émission. Cette dernière correspond à la hauteur d'émission au dessus des flammes et au phénomène de surhauteur, déterminés à partir de la puissance thermique de l'incendie. Les différentes corrélations ont été implémentées pour permettre de produire un terme d'ébauche pour le rejet de polluants. Un tel terme peut-être mis à profit dans l'application de la méthodologie d'inversion si des informations au regard des stocks et de la nature du bâtiment en feu sont disponibles, et retenu nul sinon. Les corrélations liées à la hauteur effective ont été utilisées sur l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame de Paris et révèlent une surestimation systématique des modèles de surhauteur utilisés. Ce constat a déterminé notre choix de considérer la hauteur effective comme variable d'intérêt à inverser à l'instar du débit de polluants.

Un étude bibliographique de la phénoménologie de l'écoulement atmosphérique ainsi que de la modélisation de la dispersion a été effectuée dans le chapitre 2. Dans ces travaux, un modèle diagnostique de l'écoulement atmosphérique est utilisé pour permettre l'ajustement des champs météorologiques d'entrée de modèle en fonction des caractéristiques de topographie et d'occupation des sols sur un domaine prédéfini. Ensuite, ces données sont fournies à un modèle de dispersion lagrangienne pour permettre l'évaluation de la propagation des substances émises par suivi de la trajectoire des particules. L'émission, le transport et la diffusion ainsi que la perte sont représentés à travers la modélisation, la prise en compte des réactions chimiques étant négligée dans ces travaux compte tenu des dimensions spatiales et temporelles des incendies urbains de grande ampleur. Une application sur l'incendie de

la cathédrale de Notre-Dame a permis de mettre en exergue l'importance de données météorologiques analysées par rapport aux données prévisionnelles compte tenu du système chaotique attendant. Les différences de champs de vitesse et de direction du vent pour les deux jeux de données impliquent la nécessité d'une élaboration de stratégie de prélèvement étendue pour tenter de couvrir un large domaine spatial et tenir compte de l'erreur météorologique présente dans la dispersion. Une manière de considérer cette erreur dans l'inversion serait de considérer une modélisation d'ensemble permettant de prendre en considération des incertitudes dans les champs météorologiques.

La modélisation des processus de dépôts secs, l'unique processus de dépôt rencontré lors des incendies d'intérêt, a fait l'objet d'une étude approfondie. Cette étude a permis de simuler des vitesses de dépôts secs en fonction du diamètre des particules, constituant une donnée d'entrée du modèle de dispersion des particules. Plusieurs ordres de grandeur de vitesse de dépôt ont par ailleurs fait l'objet d'une étude de sensibilité sur les résultats inverses et ont révélé une influence modérée de la vitesse de dépôt au regard des autres incertitudes associées au problème. De la même manière que la météorologie, la vitesse de dépôt pourrait faire parti des variables à intégrer à une modélisation d'ensemble, permettant ainsi de tester plusieurs vitesses de dépôts. Pour limiter le temps de calcul de simulation de la dispersion, deux bornes de vitesses pourraient être considérées.

Le formalisme des champs de concentration obtenus par la modélisation de la dispersion atmosphérique ainsi que celui des mesures de terrain ont été étudiés pour la mise en place de l'assimilation de données. La création d'une matrice source-récepteur permet de faire le lien entre ces données et est utilisée pour résoudre le problème inverse. Cet état de l'art a permis, en conjonction avec l'étude des corrélations incendie-fumées, d'identifier les éléments à retrouver par méthode inverse.

Un état de l'art sur la méthodologie inverse adaptée à des problèmes dont la source est mal connue a été effectuée dans le chapitre 3. Il s'agit de reconstituer les caractéristiques du rejet en associant résultats de modélisation et mesures effectuées sur le terrain. Ces méthodes sont définies dans un cadre bayésien et la reconstitution de la source est sous contrainte de positivité. Deux méthodes ont été implémentées : la méthode du maximum *a posteriori* et la méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov. La première est basée sur l'algorithme L-GFBS-B, une méthode quasi-newton, pour tenir compte de la contrainte de positivité de la source. De plus, deux méthodes d'estimation du poids donné à *l'a priori*, par la méthode de la *L-curve* et de la validation croisée généralisée, permet de donner une réponse déterministe au problème inverse dans un cadre semi-bayésien. La méthode du maximum *a posteriori* a l'avantage de donner une réponse inverse avec un coût de calcul très faible (de l'ordre de la minute), apprécié en situation opérationnelle. La seconde est une méthode bayésienne qui permet de reconstituer la source et les incertitudes associées par échantillonnage de la distribution *a posteriori*. Cette méthode est basée sur l'algorithme de Metropolis-Hastings et représente un coût de calcul plus long que la première méthode, dans des temps cependant raisonnables (de l'ordre de 30 minutes). L'implémentation de ces méthodes inverses a été validée sur l'incendie de la cathédrale de Notre-Dame de Paris et testées avec l'erreur constatée entre les données météorologiques d'analyse et de prévision.

Trois études ont été effectuées : une étude sur la comparaison des méthodes d'estimation du poids donné à *l'a priori* avec inversion globale des espèces, puis une inversion indépendante des espèces et enfin une étude de sensibilité à l'ébauche sur les résultats inverses. La première étude révèle des résultats similaires avec les deux méthodes d'estimation du poids donné à *l'a priori*, la GCV et la *L-curve*, et un coût de minimisation légèrement plus faible avec

la méthode de validation croisée généralisée préférée dans le cas d'un système inverse non linéaire (induit de la contrainte de positivité de la source). Une inversion indépendante des espèces donne des résultats inverses identiques à une inversion globale lorsque les matrices liées aux erreurs sont configurées diagonales et initialisées de la même manière. Néanmoins, dans une configuration où les matrices liées aux erreurs ne sont pas diagonales et/ou avec des hyper-paramètres indépendants pour chaque espèce, une inversion globale pourrait permettre de mieux prendre en compte les erreurs de représentativité de chaque espèce. Enfin, une ébauche, même partielle, permet d'améliorer les scores des indicateurs statistiques et une ébauche constante temporelle ne contraint pas la solution. En particulier, un *a priori* pourrait être formulé sur la base d'une estimation du cycle de l'incendie (représenté par une phase de croissance, de plein développement et de décroissance), par exemple, en fonction de l'action des pompiers pour éteindre l'incendie (Daly et al., 2012).

Par ailleurs, trois stratégies de prélèvement ont été testées pour chaque étude de sensibilité. Cette application révèle qu'une stratégie de prélèvement en champ proche (entre 2 et 6 km) qui tient compte d'un temps de déclenchement et de déplacement (une heure après le début de l'incendie) permet de reconstituer partiellement l'émission sur la première heure. Des mesures supplémentaires plus éloignées de la source (entre 9 et 12 km) sont souhaitables pour tenir compte de la ségrégation entre espèces sédimentées et non sédimentées et permettre de reconstituer la granulométrie des particules émises sur la dernière heure de l'incendie.



L'ensemble de ces travaux ont permis de constituer un système d'assimilation de données pour l'identification de l'impact des fumées d'incendies. Ce système a été appliqué à un cas réel d'incendie de grande ampleur survenue près de Paris en 2021. La méthodologie appliquée à cet incendie a fait l'objet d'une publication soumise, décrite dans le chapitre 4. Des ajustements des méthodes inverses ont été proposés pour répondre aux besoins opérationnels, notamment en ce qui concerne la prise en compte des concentrations de fond dans le système inverse. Les améliorations apportées à notre système d'inversion nous ont permis d'identifier les concentrations de fond par type de station et constantes dans le temps. L'estimation des concentrations de fond permet d'éviter la recherche d'une valeur à soustraire des observations, difficile à estimer en situation opérationnelle. Ces estimations sont du même ordre de grandeur que les estimations annuelles d'AirParif et cohérentes avec les observations hors de la trajectoire du panache. Cependant, ces concentrations de fond, supposées constantes dans le temps, ne semblent pas adaptées pour les heures de décroissance d'un incendie jumelées à une croissance des concentrations de fond. Les expériences numériques montrent que notre méthode bayésienne est sensible à la représentation des concentrations de fond dans les résultats des émissions de taux de rejet. Par conséquent, il pourrait être intéressant d'envisager par la suite une représentation des concentrations de fond non seulement par typologie de station, mais aussi par pas de temps. Une autre approche de la représentation des concentrations de fond pour les stations de surveillance du trafic consisterait à choisir, par exemple, une évolution temporelle habituelle des cycles réguliers liés au trafic. Par ailleurs, la prise en compte des données de qualité de l'air prévisionnelles au niveau des stations de mesures d'AirParif permettrait d'avoir un *a priori* sur les concentrations de fond. La représentation des concentrations de fond pourrait également être améliorée en ayant un *a priori* sur les émissions, en particulier par la prise en compte des phases de l'incendie.

L'inclusion des variances des matrices de covariance liées aux erreurs d'observation et *a priori* en tant que variables échantillonnées réduit l'importance de leur initialisation, ce qui est très utile dans les situations opérationnelles. Les matrices de covariances sont par définition définies diagonales. Cette hypothèse suppose, notamment pour la matrice d'erreur d'observations, que la même erreur est attribuée à toutes les observations. Une manière de mieux représenter la réalité serait de considérer cette matrice diagonale par bloc ou complètement indépendante sur la diagonale. Cette dernière proposition suppose de retrouver un plus grand nombre d'inconnues pour un nombre restreint d'observations. Une manière de limiter le nombre d'inconnues supplémentaires est de considérer, comme les concentrations de fond, deux valeurs diagonales pour représenter les deux typologies de stations et permettre de compenser, ou du moins de tenter de compenser, l'erreur sur les concentrations de fond. Une comparaison de résultats obtenus en considérant des lois de distributions autre que gaussiennes pour décrire les probabilités *a priori* et de vraisemblance, notamment les lois log-normale et log-Gamma, permettraient de reconsidérer la définition des matrices liées aux erreurs et valider ou invalider davantage de résultats.

Pour diminuer la sensibilité du système inverse à ces matrices, une autre manière de faire consiste à améliorer la représentativité du modèle de dispersion. Cela peut s'effectuer par la prise en compte du bâti dans les zones urbaines. Or, étant donné la résolution spatiale du modèle et son étendue, le coût de calcul serait décuplé, voire incompatible avec les ressources machines. La mise en place d'un couplage entre zones avec et sans bâti pourrait permettre de trouver un compromis entre représentativité du modèle et temps de calcul associé. Les zones pourraient être préalablement identifiées par les zones les plus impactées par les retombées du panache au niveau du sol. Une seconde manière d'améliorer la prise en compte de la représentativité du modèle serait de considérer d'autres modèles de dispersion avec différentes approches. Par exemple, un modèle à bouffées gaussiennes permettrait une identification des zones les plus impactées par la pollution résultante de l'incendie tout en limitant le temps de simulation. Par ailleurs, nous avons considéré dans ces travaux des transformations physico-chimiques négligeables des particules au vu des dimensions des incendies urbains de grande ampleur. Une manière de confirmer ou d'infirmer cette hypothèse serait de considérer des particules non inertes. Dans ce cas, des modèles de dispersion basés sur un couplage gaussien-eulérien permettraient de limiter le temps de calcul par rapport à un modèle lagrangien réactif tout en améliorant le traitement des émissions de source ponctuelle par rapport à un modèle gaussien ou eulérien.

Par ailleurs, l'amélioration de la représentativité des observations permettraient de réduire les erreurs du système inverse. Une stratégie de prélèvement élaborée à l'aide de la modélisation de la dispersion atmosphérique directe permettrait d'acquérir des observations pertinentes pour l'inversion. Une orientation future de la recherche pourrait consister à assimiler les observations de terrain à une résolution spatiale plus élevée, notamment par le biais de drones ou de lidars. En effet, la source de fumées d'incendies est soumise à la flottabilité et les concentrations sont ainsi donc plus élevées au niveau de la hauteur d'émission effective du panache. Cela permettrait de renforcer le système inverse de discrimination des hauteurs d'émission, pour lequel les mesures au sol ont leurs limites.



Deux stratégies de paramétrage des hauteurs d'émission ont été implémentées. La première consiste à trouver les distributions associées aux taux de rejet pour toutes les hauteurs d'émission prédéfinies à partir de la modélisation directe. La seconde consiste à inverser la

hauteur d'émission pour obtenir une intensité de rejet associée. Cette dernière méthode a l'avantage de fournir une seule hauteur d'émission par pas de temps, ce qui est généralement la façon de définir une source majeure de fumée d'incendie et est plus facile à analyser. Dans certains cas, cependant, plusieurs hauteurs d'émission par pas de temps peuvent être nécessaires pour décrire le rejet, d'où l'avantage de la première stratégie. Les deux méthodes ont permis d'identifier la phase intensive de l'incendie et notamment un taux de rejet cumulé maximal sur plusieurs hauteurs de l'ordre de  $2\ 500\text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  avec la première méthode et de  $2\ 000\text{ kg}\cdot\text{h}^{-1}$  sur une hauteur avec la seconde méthode. Cette seconde approche a permis de qualifier la hauteur d'émission comprise entre 215 m et 285 m pour la phase intensive de l'incendie conformément aux observations visuelles (entre 100 m et 300 m).

La reconstitution du débit de particules par méthode inverse a permis d'identifier un taux de production de particules qui est communément compris dans une large gamme de valeurs pour les incendies. Avec l'évaluation de la surface en feu par des images drones et plusieurs vitesses spécifiques de combustion pour différents matériaux considérés présents dans l'entrepôt incendié, le taux de production retrouvé est de l'ordre de  $0,01 - 0,02\text{ g/g}$ . Cet ordre de grandeur coïncide avec des éléments de littérature pour les feux de végétation prescrits. De plus, la reconstitution de la hauteur d'émission par la méthodologie inverse a permis de comparer nos résultats avec les résultats obtenus par la modélisation de la surhauteur. Il en résulte que les modèles de surhauteur surestiment la hauteur finale atteinte par le panache. Une régression linéaire multiple des coefficients relatifs au modèle de surhauteur de Zonato et al. (1993) a permis de définir une médiane de coefficients situées dans la gamme de valeurs des coefficients ajustés par Fisher (2001) pour le modèle de Zonato et pour laquelle le modèle de surhauteur coïncide avec les résultats inverses obtenus (215 m et 285 m).



En définitive, la modélisation inverse appliquée à d'autres cas réels permettraient de rendre plus robuste les résultats obtenus sur les modèles de surhauteur par rapport aux hauteurs d'émission effectives retrouvées. Plus généralement, des expériences réelles répétées permettrait d'affiner cette démarche scientifique développée pour la quantification de l'impact des fumées d'incendies.

# Table des figures

1	Bilan annuel du support LCPP dans le cadre d'une stratégie de prélèvement pour l'estimation de la pollution d'incendies dans la région Île-de-France. . . . .	7
2	Ressources du LCPP pour évaluer les risques des fumées d'incendies de grande ampleur pour la santé et l'environnement . . . . .	8
1.1	Lien entre particule irrégulière, diamètre de Stokes et diamètre aérodynamique. $d_i$ est le diamètre de la particule associée à la forme irrégulière, $d_s$ est le diamètre de Stokes équivalent et $d_a$ est le diamètre aérodynamique équivalent. $\rho_p$ est la densité de la particule, $\rho_a$ est la densité de la particule définie pour un diamètre aérodynamique et $\rho_\infty$ est la densité de l'air. $w_s$ est le résultat de la vitesse de sédimentation calculée à l'aide de la formule de Stokes (2.14). Le facteur de forme $\chi = 1,36$ est tiré de (DeCarlo et al., 2004) descriptif du quartz. . . . .	15
1.2	Caractéristiques d'un panache d'incendie, notamment les variations verticales d'augmentation de la température $\Delta T_{ax}$ sur l'axe central du panache et de la vitesse $v_{ax}$ des fumées. $L$ définit la hauteur de la flamme. Basé sur Heskestad G. (1984). . . . .	16
1.3	Profil gaussien $f_{\Delta T}(r)$ de l'augmentation de la température en fonction du rayon $r$ associé à la température des fumées à une altitude fixée. . . . .	18
1.4	Dispersion d'un panache à proximité de la source. Le phénomène est décomposé en une phase transitoire d'élévation (hachurée) et une phase de dispersion. $\Delta z$ est la surhauteur par rapport à $z_s$ la hauteur d'émission. . . . .	20
1.5	Configuration de pénétration partielle dans une couche d'inversion avec deux surhauteurs $\Delta z$ et $\Delta z'$ ; $z_s$ la hauteur d'émission. . . . .	21
1.6	Résultat de l'application de la surhauteur de Briggs, Mills et Zonato sur 15 km dans la direction du vent. La zone grisée représente la hauteur finale estimée dans (INERIS, 2019). . . . .	26
2.1	Structure verticale de l'atmosphère. Adapté de (Malardel, 2009) . . . . .	29
2.2	Évolution de la stabilité de la CLA au cours de la journée. . . . .	30
2.3	Représentation de l'inversion de température : inversion en hauteur le jour ( $z_i$ de l'ordre de 100 m à gauche) et inversion près du sol la nuit ( $z_i$ de l'ordre de 10 m à droite). . . . .	34
2.4	Processus intervenants dans le dépôt sec en fonction de l'altitude $z$ pour les particules. . . . .	35
2.5	Processus intervenants dans la représentation du dépôt sec dans la couche quasi-laminaire. . . . .	36
2.6	Schéma du modèle PMSS : modèle CFD simplifié constitué d'un modèle météorologique 3D (Swift) et d'un modèle lagrangien à particules (Spray). . . . .	37
2.7	Principe de fonctionnement de Micro Swift en 4 étapes. . . . .	38

2.8	Équation du mouvement d'une particule avec un pas de temps $\Delta T$ . . . . .	40
2.9	Schématisation des conditions sur $b$ au niveau de la surface définies par Monin (1959). Pour chaque condition, une flèche grise correspond à la vitesse de sédimentation $w_s$ ou à la vitesse de diffusion $w_d$ , tel que $w = w_d + w_s$ (flèche verte). . . . .	43
2.10	Profil de vent tracé des données météorologiques d'analyses pour les heures de l'incendie (à gauche) et différences prévisions-réanalyses (à droite). . . . .	46
2.11	Concentrations obtenues au niveau de la surface entre 17 :00 UTC et 21 :00 UTC et cumulées sur toutes les tailles de particules; différence normalisées $C_{analyses} - C_{previsions}$ obtenue (en pourcentage des maxima des concentration $C_{analyses}$ et $C_{previsions}$ ). . . . .	47
3.1	Représentation de la méthode L-curve pour une régularisation de Tikhonov standard. L'abscisse mesure l'écart par rapport aux observations et l'ordonnée l'écart par rapport à l'ébauche. Adapté de (Hansen, 2010). . . . .	57
3.2	Échantillonnage d'une distribution à deux variables par le principe MCMC : pour un nombre donné d'itérations, un nouvel état est proposé au système à partir d'un état précédent, selon une probabilité de transition. Ce nouvel état est soit accepté, soit rejeté. S'il est accepté, le nouvel état remplace l'ancien, sinon un nouvel état est proposé à nouveau à partir de l'ancien. . . . .	61
3.3	Stratégie de prélèvement A : couverture temporelle complète et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0 – 6 km, 2 : couverture 6 – 12 km dans la direction du vent depuis la source. . . . .	62
3.4	Stratégie de prélèvement B : réduction temporelle du scénario A. Couverture temporelle en tenant compte du temps d'intervention et de déclenchement ( $\sim 1h$ ) et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0 – 6 km, 2 : couverture 6 – 12 km dans la direction du vent depuis la source. . . . .	63
3.5	Stratégie de prélèvement C : réduction spatiale du scénario B. Couverture temporelle en tenant compte du temps d'intervention et de déclenchement ( $\sim 1h$ ) et couverture spatiale divisée en deux équipes. 1 : couverture 0 – 3 km, 2 : couverture 0 – 6 km dans la direction du vent depuis la source. . . . .	64
3.6	Émissions de plomb considérées lors de l'incendie de la cathédrale Notre-Dame (INERIS, 2019). . . . .	65
3.7	Distribution granulométrique massique considérée correspondant à l'hypothèse 1 du document (INERIS, 2019). Les particules considérées sont des $PM_{d=1,5}$ , $PM_{d=15}$ , $PM_{d=30}$ , et $PM_{d=50}$ , avec "d" le diamètre. . . . .	65
3.8	Coefficients de la matrice $H$ pour une ligne $i$ relative à une observation $y_i$ et pour trois colonnes relatives aux impulsions formulées en fonction des émissions (figure 3.6) . . . . .	66
3.9	Résultat $m$ de débit reconstitué (en ordonnée) pour chaque temps d'émission (en abscisse), pour chaque stratégie de prélèvement A, B et C (en bleu, orange et vert) et pour chaque espèce (du plus clair pour les particules de petit diamètre au plus foncé pour les particules de plus grand diamètre), avec $m_b = m_{INERIS}$ . . . . .	68
3.10	$\lambda$ optimal retrouvé par deux méthodes d'estimation lorsque le vecteur d'ébauche $x_b$ est égal à la solution $m_{INERIS}$ que l'on souhaite retrouver. . . . .	69

3.11	Résultat $x$ de débit reconstitué (en ordonnée) pour chaque temps d'émission (en abscisse), pour chaque stratégie de prélèvement A, B et C (en bleu, orange et vert) et pour chaque espèce (du plus clair pour les particules de petit diamètre au plus foncé pour les particules de plus grand diamètre), avec $x_b = 10^{\text{IR} N_{\text{var}}}$ et les composantes en $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ . . . . .	73
4.1	Maximum $\text{PM}_{10}$ concentration of observations at each station available during the fire (in $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ ). . . . .	76
4.2	Observed $\text{PM}_{10}$ concentrations at Boulevard Haussmann station showing the greatest impact of the Aubervilliers's fire plume. . . . .	77
4.3	List of presented inversion configurations. 1 : reference case 2 : reference case w/o background concentrations inversion 3 : reference case w/o model error inversion 4 : reference case w/o prior error inversion 5 : w emission height inversion	83
4.4	Case 1–A. (4.4a) Means of the posterior distributions obtained for the emission rate $\mathbf{m}$ (in $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the five predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations $\sigma_m$ in black. (4.4b) Posterior distribution of the background concentrations in $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ during the fire.	85
4.5	Case 1–A. Concentrations reconstructed using the mean of $\mathbf{m}$ distributions versus the measured concentrations and uncertainties reconstructed using the standard deviation of the distributions; mean background pollution concentrations by type of station; FAC2 boundaries. . . . .	86
4.6	Case 2–A. Means of the posterior distributions obtained for the emission rate $\mathbf{m}$ (in $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the five predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations $\sigma_m$ in black. . . . .	87
4.7	Means of the posterior distributions ( $\bar{\mathbf{m}}$ ) obtained for the release rates (in $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ) during the five hours ( $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ ) of fire and for the eleven predefined emission heights; cumulative values obtained per time step in red; and representation of the distributions' standard deviations $\sigma_m$ in black. . . . .	89
4.8	(4.8a) Release rates $\mathbf{m}$ marginal posterior distribution in $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ at time $T_4$ for each height in $\mathcal{Z}_{100:600}$ . (4.8b) Concentrations contribution reconstructed at the traffic station "Avenue des champs Élysées" from the distributions mean ( $\bar{\mathbf{m}}$ ) at all times $T_i, i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ ; observations in black; total recovered concentration in red. The colours are shared for figures a and b. . . . .	90
4.9	H Jacobian matrix extraction for the station "Avenue des champs Elysées" 7.3 km from the source; y-axis : the last hour of the observation, x-axis : emission at time $T_4$ for each volume height source in $z$ ; in the squares, the dimensionless coefficients of $\mathbf{H}$ . . . . .	90
4.10	Posterior distributions for (4.10a) the heights (in m) and (4.10b) the release rates (in $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ ), at the five emission times $T_i, i \in \{0, \dots, 4\}$ . . . . .	91
4.11	Smoke source term reconstructed for times $T_i, i = \{0, 1, 2\}$ with $\text{med}(z_i)$ used for the height and $\bar{\mathbf{m}}_i$ for the release rates. . . . .	93
4.12	Predictions in red (using the source described in figure 4.11) versus the observations and uncertainties reconstructed using the standard deviation of the distributions; background concentrations mean by type of station; FAC2 boundaries.	93
4.13	Application du modèle de dépôt de Zhang . . . . .	95

4.14	Intensité de rejet résultante du MCMC par hauteur d'émission en $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ pendant l'incendie. . . . .	97
4.15	Résultat d'application de la surhauteur de Zonato $\Delta z_0$ et de la formulation de la hauteur de source $z_s$ pour les puissances thermiques considérées. Les résultats obtenus avec les coefficients $a, b, c$ et $d$ de Zonato et al. (1993) (à gauche) et les résultats obtenus avec les coefficients $a, b, c$ et $d$ moyens de Fisher (2001) (à droite). Les résultats inverses sur la hauteur finale atteinte par le panache sont reportés sur la zone grise pour la phase intensive de l'incendie. . . . .	100
C.1	Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement A et le vecteur d'ébauche $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ . . . . .	121
C.2	Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement B et le vecteur d'ébauche $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ . . . . .	121
C.3	Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement C et le vecteur d'ébauche $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ . . . . .	122
D.1	MCMC principe. . . . .	124

# Liste des tableaux

1.1	Résultats de l'application de la surhauteur de Briggs $\Delta z_B$ et de Mills $\Delta z_M$ pour $x = 100$ m et $x = x_f$ , pour différents diamètres $D_{feu}$ , et pour les deux puissances convectives considérées. Pour $Q_c = 750$ MW, $x_f = 4018$ m et pour $Q_c = 1500$ MW, $x_f = 5302$ m. . . . .	25
2.1	Valeurs du facteur de correction de Cunningham en fonction du diamètre de particules (Seigneur, 2018) . . . . .	44
3.1	Taux d'émission de plomb $d_p$ (en $kg \cdot h^{-1}$ ) en fonction de la distribution granulométrique (figure 3.7) et des émissions répertoriées dans la figure 3.6. . . . .	66
3.2	Résultats d'inversion pour la méthode GCV et la méthode L-curve avec inversion globale des espèces $PM_{d=1,5}$ , $PM_{d=15}$ , $PM_{d=30}$ , $PM_{d=50}$ , et $\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{INERIS}$ . Le scénario A contient 128 observations, le scénario B contient 96 observations et le scénario C contient 48 observations pour chaque espèce. . . . .	69
3.3	Résultats d'inversion indépendante des espèces $PM_{d=1,5}$ , $PM_{d=15}$ , $PM_{d=30}$ , $PM_{d=50}$ pour $\mathbf{x}_b = \mathbf{m}_{INERIS}$ avec la méthode GCV. Le scénario A contient 32 observations, la stratégie B contient 24 observations et la stratégie C, 12 observations pour chaque espèce. . . . .	70
3.4	Résultats d'inversion pour différentes valeurs d'ébauche $\mathbf{x}_b$ avec la méthode du maximum <i>a posteriori</i> avec la GCV et une inversion globale des espèces $PM_{d=1,5}$ , $PM_{d=15}$ , $PM_{d=30}$ , $PM_{d=50}$ . Le scénario A contient 128 observations, le scénario B contient 96 observations et le scénario C contient 48 observations pour chaque espèce. . . . .	72
4.1	Statistical indicators for the different inversion configuration investigated. The case numbers correspond to the inversion configuration outlined in figure 4.3. A, B and C are direct modelling profiles considered for the tests : A : $\mathcal{Z}_{100:300}$ & volume source B : $\mathcal{Z}_{100:300}$ & surface source C : $\mathcal{Z}_{100:600}$ & volume source . . . . .	84
4.2	Means and standard deviations results from posterior distributions $\mathbf{m}$ in $kg \cdot h^{-1}$ and $\mathbf{c}$ in $\mu g \cdot m^{-3}$ ; for each time $T_i$ , $i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ ; mean square root results and their associated standard deviation for $r$ and $b_m$ in $\mu g \cdot m^{-3}$ and $b_m$ in $kg \cdot h^{-1}$ . . . . .	88
4.3	Means, median and standard deviations results from posterior distributions $\mathbf{m}$ in $kg \cdot h^{-1}$ and $\mathbf{z}$ in m; for each time $T_i$ , $i \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ of case 1-C. . . . .	91
4.4	Résultats obtenus avec la méthode MCMC. Le paramètre cumulé $\mathbf{x}$ par hauteur d'émission (en $kg \cdot h^{-1}$ ) et le paramètre $\sqrt{r}$ en $\mu g \cdot m^{-3}$ sont calculés à partir du coût minimum trouvé; le paramètre $\sigma_x$ estimé avec les 500 000 derniers états acceptés. . . . .	96
4.5	Taux de production $\tau_{polluant}$ retrouvé par l'application de la formule (1.4) avec le débit reconstitué par inversion. . . . .	98

4.6	Puissance $HRRPUA$ calculée en fonction de matériaux et puissances thermiques totale résultantes en fonction de la surface en feu estimée. . . . .	99
4.7	Coefficients $a, b, c$ et $d$ pour le modèle de surhauteur de Zonato et al. (1993) : valeurs originelles de Zonato et al. (1993), valeurs étudiées par Fisher (2001), et valeurs retrouvées dans ces travaux par régression linéaire multiple pour différentes puissances thermiques. . . . .	100
A.1	Analyse de sensibilité au paramètre de température ambiante $T_{\infty}$ et de la masse volumique de l'air $\rho_{\infty}$ pour plusieurs valeurs de puissance. Le paramètre d'augmentation maximale de température est fixé à $\Delta T_{ax} = 650$ K. . . . .	118
B.1	Classe de stabilité d'après (Turner, 2020) le jour. . . . .	119
B.2	Classe de stabilité d'après (Turner, 2020) la nuit. . . . .	119
B.3	Correspondances entre la Longueur de Monin-Obukhov $L_{MO}$ , la stabilité de l'atmosphère et la classe de Parquill. . . . .	120

# Nomenclature

$a$	terme des équations lagrangiennes avec la condition <i>well mixed</i>
$b$	condition de Monin
$b_{\Delta T}$	rayon du panache en fonction de l'augmentation moyenne de température (m)
$\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}}$	matrice de covariance liée à l'erreur d'ébauche
$C$	concentration en un point ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$C_{\text{dry}}$	concentration au premier niveau ( $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$C_c$	facteur de correction de Cunningham
$C_p$	capacité calorifique massique de l'air à pression constante ( $\text{kJ K}^{-1} \text{kg}^{-1}$ )
$C_v$	capacité calorifique massique de l'air à volume constant ( $\text{kJ K}^{-1} \text{kg}^{-1}$ )
$C_\infty$	capacité calorifique massique de l'air à pression constante ( $\text{kJ} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1}$ )
$c_\lambda$	courbure géométrique ( $\text{m}^{-1}$ ou $\text{rad}\cdot\text{m}^{-1}$ )
$d$	diamètre de particule (m)
$d_a$	diamètre aérodynamique d'une particule (m)
$d_p$	diamètre de forme d'une particule irrégulière (m)
$d_s$	diamètre de Stokes d'une particule (m)
$D_m$	diffusion moléculaire ( $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ )
$D_s$	débit massique constant ( $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$ )
$D_{\text{feu}}$	diamètre équivalent de la surface en feu (m)
$d_f$	débit total d'émission des fumées ( $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ )
$d_p$	débit d'émission de polluant ( $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$ )
$\mathbf{e}^0 = \mathbf{e}^\mu + \mathbf{e}^r$	erreur d'observation
$\mathbf{e}^\mu$	erreur de mesure
$\mathbf{e}^r$	erreur de représentativité
$E_0$	flux cinématique d'évaporation ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ )
$E_B$	efficacité de collecte par diffusion brownienne (%)
$E_{\text{IM}}$	efficacité de collecte par impaction (%)
$E_{\text{IN}}$	efficacité de collecte par interception (%)
$E$ et $F$	taux d'entraînement du panache ( $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ )
$\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{obs}}}$	matrice filtre de Thikonov
$F_b$	paramètre de flottabilité initiale ( $\text{m}^4\cdot\text{s}^{-3}$ )
$f_{\Delta T}(r)$	profil gaussien de l'augmentation de la température
$f_u(r)$	profil gaussien de la vitesse d'éjection
$F_{\text{dry}}$	flux de dépôt sec ( $\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$ )
$f_p$	facteur de correction pour le rebond
$f_i$	coefficient $i$ de la matrice $\mathbf{F}$
$g$	constante d'accélération gravitationnelle ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$ )
$\mathcal{G}$	fonctionnelle GCV à minimiser
$\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{obs}}}$	opérateur d'observation
$h_{i,j}$	coefficient de l'opérateur d'observation
$\mathbf{H}_t \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{obs}}}$	opérateur exact d'observation
$h$	hauteur (m)
$H_0$	humidité (sans dimension)
$hum$	humidité spécifique (proportion en masse de vapeur d'eau dans l'air en $\text{kg}\cdot\text{kg}^{-1}$ )
$\mathbf{I}_v$	matrice identité de taille $N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}$
$\mathcal{J}$	fonction de coût
$\mathbf{K}^*$	gain

$K_\lambda$	gain en fonction de $\lambda$
$K$	coefficient de diffusion ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )
$L$	hauteur de flamme (m)
$L_{\text{MO}}$	Longueur de Monin-Obukhov (m)
$m''$	vitesse spécifique de combustion ( $\text{g} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$\mathbf{m} \in \mathbb{R}^{N_m}$	vecteur de quantité de masse émise (en $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$ )
$\mathbf{m}_b \in \mathbb{R}^{N_m}$	vecteur contenant l'ébauche de la quantité de masse émise (en $\text{kg} \cdot \text{h}^{-1}$ )
$m_{\text{par}}$	masse portée par une particule (m)
$m_{\text{dep}}$	masse déposée (m)
$N_{\text{puff}}$	nombre de bouffée gaussienne
$N_m, N_{\text{var}}$	entiers
$P$	pression (kPa)
$P_0$	pression atmosphérique au sol (kPa)
$p_c$	production de turbulence due au cisaillement ( $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ )
$p_f$	production d'énergie cinétique turbulente due à la flottabilité ( $\text{s}^2 \cdot \text{m}^{-1}$ )
$Q_0$	flux cinématique de chaleur sensible
$Q_t$	taux total d'énergie dégagée par le feu i.e. flux de chaleur de la source (kW)
$Q_c$	taux de chaleur sensible dégagée par le feu (kW)
$r$	rayon du panache (m)
$ray$	rayonnement solaire par unité de surface ( $\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$ )
$\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}} \times N_{\text{obs}}}$	matrice de covariance liée à l'erreur modèle
$R_a$	résistance aérodynamique
$R_s$	résistance de surface
$S$	paramètre de stabilité statique de Briggs ( $\text{s}^{-2}$ )
$S_{\text{feu}}$	surface équivalente du combustible en feu ( $\text{m}^2$ )
$S$	terme source
$Sc$	facteur de Schmidt
$St$	facteur de Stockes
$S$	terme de stabilité
$T_0, T_1, T_2, T_3, T_4$	heures de l'incendie $z$ (K)
$T$	température à l'altitude $z$ (K)
$T_L$	temps lagrangien
$T_\infty$	température ambiante (K)
$T_{\text{ax}}$	température maximale sur la médiane du panache (K)
$T_f$	température du gaz émis (K)
$v_{\text{ax}}$	vitesse maximale d'éjection de l'effluent au niveau de la médiane du panache ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$U$	vecteur de vent
$U'$	vecteur de turbulence
$v_f$	vitesse moyenne d'éjection de l'effluent ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$u_{10}$	vitesse moyenne du vent à 10 m ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$\bar{u}$	vent moyen ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$u^*$	vitesse de friction ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}} \times N_{\text{var}}}$	matrice orthogonale de la décomposition SVD de $\mathbf{H}$
$u_i$	coefficient $i$ de la matrice $\mathbf{U}$
$v$	somme des composantes verticales de la vitesse ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$v_i^T$	coefficient $i$ de la matrice $\mathbf{V}^T$
$\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}}$	une matrice qui satisfait $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$ de la décomposition SVD de $\mathbf{H}$
$w_s$	vitesse de sédimentation ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$w$	vitesse de dépôt total ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$w_d$	vitesse de diffusion ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$x$	distance à la source du panache dans la direction du vent (m)
$x_f$	critère de stabilité de la surhauteur du panache dans la direction du vent (m)
$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	vecteur contenant les variables à inverser
$\mathbf{x}_{\text{new}} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	nouveau vecteur échantillonné (MCMC) contenant les variables à inverser
$\mathbf{x}_{\text{old}} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	ancien vecteur échantillonné (MCMC) contenant les variables à inverser
$\mathbf{x}_\lambda \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	vecteur contenant les variables à inverser en fonction de $\lambda$
$\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	vecteur exact contenant les variables à inverser

$\mathbf{x}_b \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$	vecteur contenant l'ébauche des variables à inverser
$\mathbf{X}$	position d'une particule
$\mathbf{X}_0$	position initiale d'une particule
$x_s, y_s, z_s$	coordonnées de la source (m)
$\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$	vecteur contenant les concentrations observées (en $\mu\text{g}\cdot\text{s}^{-3}$ )
$\mathbf{y}_0$	composante de $\mathbf{y}$ qui contient l'information supplémentaire apportée par le vecteur $\mathbf{y}$ dans un système sur-contraint
$\mathbf{y}_p \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$	vecteur de prédictions contenant les concentrations retrouvées après inversion (en $\mu\text{g}\cdot\text{s}^{-3}$ )
$z_i$	hauteur où le gradient vertical de température s'inverse (m)
$z_{\text{ref}}$	hauteur pour le calcul de la vitesse du vent (m)
$z_s$	hauteur de surface (m)
$z_r$	hauteur de référence pour le profil de vitesse du vent (m)
$z_1, z_2$	hauteur (m)
$z_0$	longueur de rugosité (m)
$z$	altitude (m)
$z_v$	origine virtuelle du panache suivant l'axe $z$ (m)
$z_B$	surhauteur de panache de Briggs (m)
$z_f$	hauteur finale atteinte par le panache (m)
$z_M$	surhauteur de panache de Mills (m)
$z_s$	hauteur atteinte par le panache au dessus des flammes (m)

---

#### Lettres grecques

$\alpha_a$	taux d'acceptation (sans dimension)
$\alpha_c$	fraction convectée (sans dimension)
$\alpha$	coefficient empirique
$\beta$	coefficient empirique
$\beta_{\text{incl}}$	coefficient d'inclinaison du panache (sans dimension)
$\Delta C$	chaleur de combustion ( $\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ )
$\delta \mathcal{J}$	variations de la fonction de coût $\mathcal{J}$
$\Delta T_{\text{ax}}$	différence moyenne de température entre l'effluent au niveau de la médiane du panache et l'air ambiant (K)
$\Delta z, \Delta z'$	surhauteur verticale (m)
$\Delta t$	discrétisation temporelle
$\epsilon_0$	coefficient empirique
$\eta$	rendement de combustion (sans dimension)
$\gamma$	coefficient empirique
$\kappa$	constante de von Kármán
$\lambda^2 = r/b$	poids attribué au terme de régularisation de Tikhonov $(\mu\text{g}\cdot\text{s}^{-3})^2/(\text{kg}\cdot\text{h}^{-1})^2$
$\Omega(t)$	domaine de définition
$\mu$	viscosité dynamique ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ )
$\phi$	fonction universelle
$\Phi$	fonction primitive de $\phi$
$\psi = \text{diag}(\sigma_i, \dots, \sigma_{N_{\text{var}}}) \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}} \times N_{\text{var}}}$	matrice diagonale de la décomposition SVD de $\mathbf{H}$ contenant les valeurs propres ordonnées
$\rho$	densité de polluant ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$\rho_a$	densité aérodynamique de particule ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$\rho_p$	densité de particule ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$\rho_\infty$	masse volumique de l'air ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ )
$\tau_{\text{polluant}}$	taux de production du polluant ( $\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$ )
$\theta_\infty$	température potentielle ambiante (K)
$\theta$	température potentielle (K)
$\sigma_x^2$	écart-types gaussiens
$\sigma_{U'}$	écart-types lagrangiens
$\sigma_i$	valeur propre $i$ de la décomposition SVD de $\mathbf{H}$
$\chi$	facteur de forme de particule
$\frac{\partial \theta}{\partial z}$	gradient de température potentielle (K/m)
$\rho_\infty$	masse volumique de l'air ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$\rho, \xi$	coordonnées paramétriques de la L-curve

$\rho', \xi'$	dérivées premières de $\rho$ et $\chi$
$\rho'', \xi''$	dérivées secondes de $\rho$ et $\chi$
$\infty$	en référence à l'air
$\theta_v$	température potentielle virtuelle (K)
$\partial\theta/\partial z$	gradient de température potentielle (K·m)
$\nabla\mathcal{J}$	jacobienne de la fonction de coût $\mathcal{J}$

# Annexe A

## Annexe du chapitre 1

### A.1 Analyse de sensibilité

Le tableau A.1 montre les résultats obtenus par analyse de sensibilité de trois valeurs de température ambiante égales à 278 K, 293 K et 308 K pour une masse volumique de l'air associée de 1,27 kg·m<sup>-3</sup>, 1,20 kg·m<sup>-3</sup>, 1,15 kg·m<sup>-3</sup>. Il s'agit d'étudier l'impact du choix de  $T_\infty$  sur les résultats des corrélations définies en section 1.2 pour trois puissances dite "convec-tées" égales à 500 MW, 1000 MW, 5000 MW. Il en résulte que les variations liées aux différentes valeurs de  $T_\infty$  et  $\rho_\infty$  sont faibles au regard des variations apportées par le changement de puissance. Or, au vu des incertitudes liées à la caractérisation de la puissance, l'impact du choix de la température ambiante est jugée négligeable. C'est pourquoi la valeur  $T_\infty = 293$  K est appliquée toutes au long de ces travaux, avec une valeur de masse volumique correspondante de 1,20 kg·m<sup>-3</sup>.

				Hypothèses		
				$Q_c = 500 \text{ MW}$	$Q_c = 500 \text{ MW}$	$Q_c = 500 \text{ MW}$
				$T_\infty = 278 \text{ K}$	$T_\infty = 293 \text{ K}$	$T_\infty = 308 \text{ K}$
				$\rho_\infty = 1,269 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,204 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,146 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$z_s \text{ (m)}$				26	26,9	27,7
$u_f \text{ (m}\cdot\text{s}^{-1})$				13,8	13,6	13,5
$b_{\Delta T} \text{ (m)}$				5,7	5,8	5,9
$d_f \text{ (kg}\cdot\text{s}^{-1})$				2247	2316	2385
				Hypothèses		
				$Q_c = 1000 \text{ MW}$	$Q_c = 1000 \text{ MW}$	$Q_c = 1000 \text{ MW}$
				$T_\infty = 278 \text{ K}$	$T_\infty = 293 \text{ K}$	$T_\infty = 308 \text{ K}$
				$\rho_\infty = 1,269 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,204 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,146 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$z_s \text{ (m)}$				34,3	35,4	36,5
$u_f \text{ (m}\cdot\text{s}^{-1})$				15,8	15,7	15,5
$b_{\Delta T} \text{ (m)}$				7,5	7,6	7,7
$d_f \text{ (kg}\cdot\text{s}^{-1})$				4494	4633	4771
				Hypothèses		
				$Q_c = 5000 \text{ MW}$	$Q_c = 5000 \text{ MW}$	$Q_c = 5000 \text{ MW}$
				$T_\infty = 278 \text{ K}$	$T_\infty = 293 \text{ K}$	$T_\infty = 308 \text{ K}$
				$\rho_\infty = 1,269 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,204 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$	$\rho_\infty = 1,146 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$z \text{ (m)}$				65,4	67,5	69,5
$u_f \text{ (m}\cdot\text{s}^{-1})$				21,8	21,6	21,4
$b_{\Delta T} \text{ (m)}$				14,3	14,5	14,7
$d_f \text{ (kg}\cdot\text{s}^{-1})$				22469	23165	23855

Table A.1 – Analyse de sensibilité au paramètre de température ambiante  $T_\infty$  et de la masse volumique de l'air  $\rho_\infty$  pour plusieurs valeurs de puissance. Le paramètre d'augmentation maximale de température est fixé à  $\Delta T_{ax} = 650 \text{ K}$ .

# Annexe B

## Annexe du chapitre 2

### B.1 Classe de stabilité de Pasquill

Le gradient vertical de température, qui dépend notamment de l'ensoleillement (le jour) et de la couverture nuageuse (la nuit), permet de décrire la stabilité de l'atmosphère par rapport au vent. Les classes de stabilité de Pasquill-Turner permettent de décrire la stabilité de l'atmosphère en fonction de ces paramètres. Il existe six classes de stabilité, de A (très instable) à F (très stable). La manière dont elles sont déterminées selon Turner (Turner, 2020) est donnée dans le tableau B.1 pour le jour et le tableau B.2 pour la nuit.

Vitesse du vent à 10 m ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ )	Rayonnement solaire fort		Rayonnement solaire modéré	
	$ray > 700 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$	$350 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2} \leq ray \leq 700 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$	$350 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2} > ray$	
$\leq 2$	A		A-B	B
2 – 3	A-B		B	C
3 – 5	B		B-C	C
5 – 6	C		C-D	D
$\geq 6$	C		D	D

Table B.1 – Classe de stabilité d'après (Turner, 2020) le jour.

Vitesse du vent à 10 m ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ )	Couverture nuageuse	
	$\geq 1/2$	$\leq 1/2$
$\leq 2$		
2 – 3	E	F
3 – 5	D	E
5 – 6	D	D
$\geq 6$	D	D

Table B.2 – Classe de stabilité d'après (Turner, 2020) la nuit.

Ces classes sont notamment utilisées pour paramétrer la stabilité des modèles gaussiens.

Enfin, d'après Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N. (2016), il existe des correspondances entre la longueur de Monin-Obukhov  $L_{MO}$  et les classes de stabilité de Pasquill. Elles sont décrites dans le tableau B.3.

Stabilité	Classe de Pasquill	
$-100 \leq L_{MO} < 0$	instable	B
$-10^5 \leq L_{MO} < -100$	instable	C
$ L_{MO}  > 10^5$	neutre	D
$10 \leq L_{MO} < 10^5$	stable	E
$0 \leq L_{MO} < 10$	stable	F

Table B.3 – Correspondances entre la Longueur de Monin-Obukhov  $L_{MO}$ , la stabilité de l'atmosphère et la classe de Parquill.

## B.2 Modélisation du lessivage

Le dépôt humide est un mécanisme physique qui élimine de la matière des panaches de gaz ou de particules émis par des effets de lavage dus à la pluie. Cet effet est traité à l'aide de coefficients de lavage dépendant de l'espèce, définis de telle sorte que, pour une espèce  $s$  (B.1)

$$\frac{dm_s}{dt} = -\Gamma m_s \quad (\text{B.1})$$

où  $m_s$  est la masse de particule de l'espèce  $s$  et  $\Gamma$  le taux de lessivage. Cela conduit à une décroissance exponentielle de la masse des particules en fonction du temps. En  $\Delta t$  un pas de temps, nous avons la relation (B.2).

$$m_s(t + \Delta t) = m_s(t)e^{-\Gamma\Delta t} \quad (\text{B.2})$$

Une paramétrisation simple permet le calcul des coefficients de lessivage  $\Gamma$ . Il s'agit de considérer le coefficient de lessivage proportionnel aux précipitations (B.3).

$$\Gamma = S_i R \quad (\text{B.3})$$

où  $R$  (mm/h) est le taux de précipitations et  $S_i$  en  $\left[ s^{-1} \cdot \left( \frac{\text{mm}}{\text{h}} \right)^{-1} \right]$  est le coefficient de lavage dépendant de l'espèce pour une précipitation normalisée de 1 mm/h.

### Modèle 2D

En fonction du coefficient de lessivage  $\Gamma$ , une fraction de la masse des particules est retirée en raison des effets de lavage et cumulée dans les cellules situées sous les positions des particules.

### Modèle 3D

En fonction du coefficient de lessivage  $\Gamma$ , et de la taille des gouttelettes, une fraction de la masse des particules est retirée en raison des effets de lavage et cumulée dans les cellules situées sous les positions des particules.

# Annexe C

## Annexe du chapitre 3

### C.1 Analyse de sensibilité avec erreur modèle

Figure C.1 – Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement A et le vecteur d'ébauche  $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ .

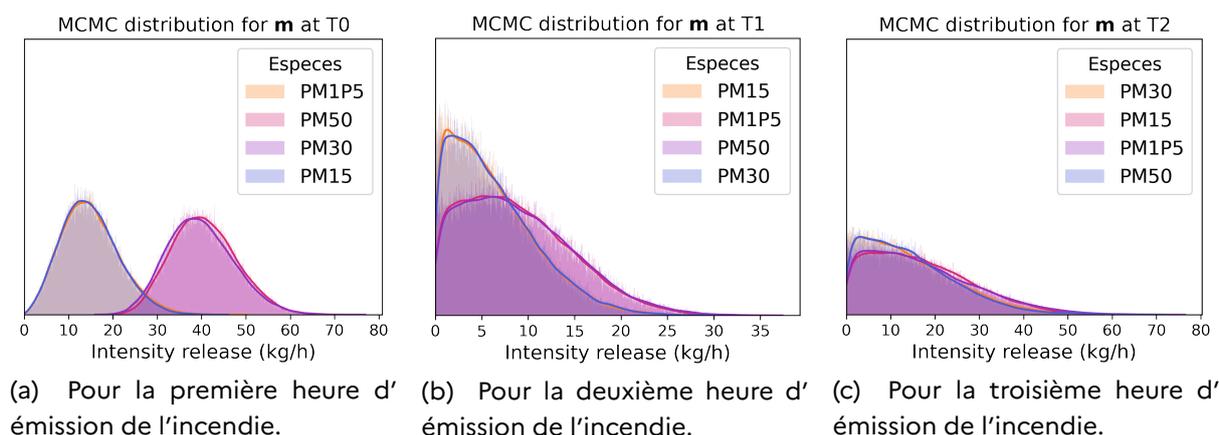


Figure C.2 – Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement B et le vecteur d'ébauche  $\mathbf{x}_b = \mathbf{10}^{\mathbb{R}^{N_{var}}}$ .

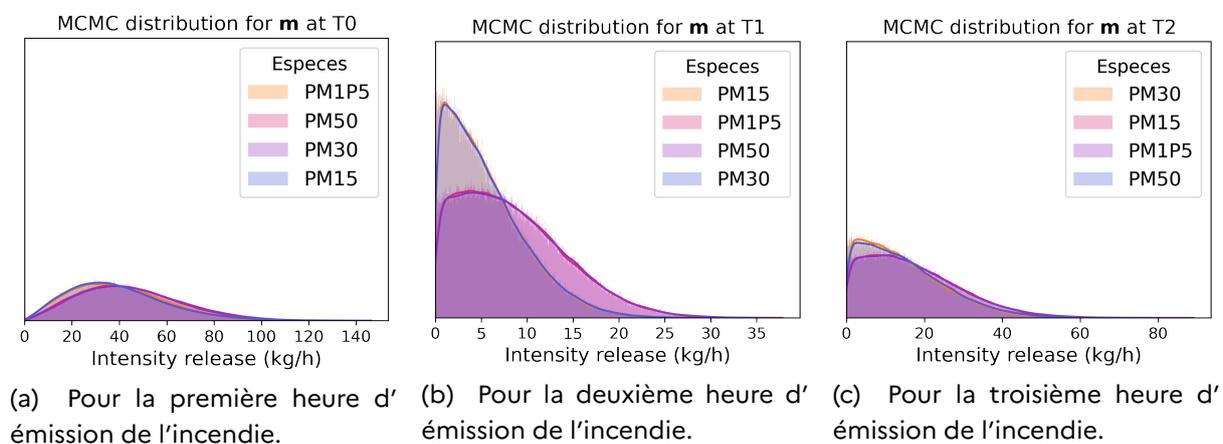
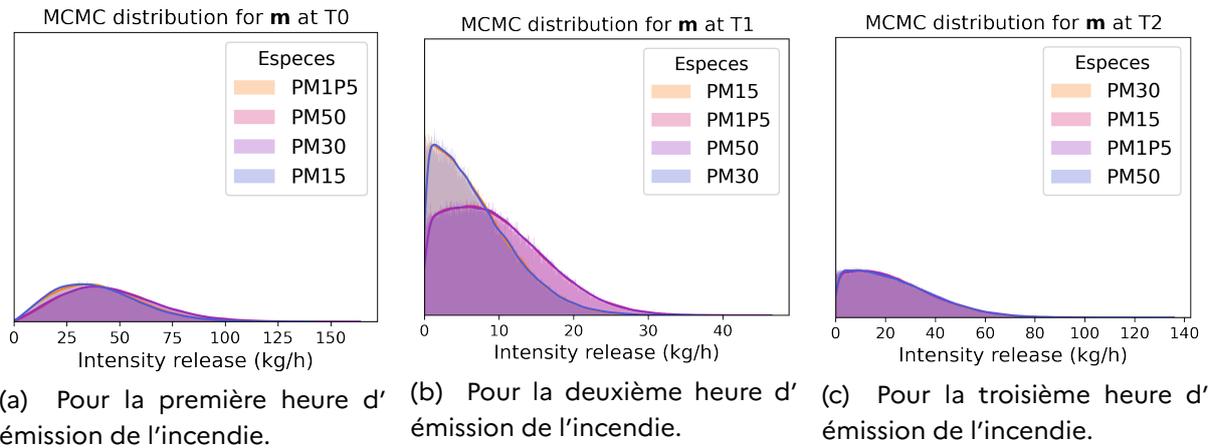


Figure C.3 – Distributions a posteriori retrouvées par application de la méthode MCMC pour la stratégie de prélèvement C et le vecteur d'ébauche  $\mathbf{x}_b = 10^{\text{Re}N_{var}}$ .



# Annexe D

## Annexe du chapitre 4

### D.1 MCMC method

The method applied to retrieve the smoke source term parameters and their uncertainties is a Bayesian Monte Carlo sampling method. The inverse problem can be expressed in terms of Bayes' rule (D.1), given  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$  the set of variables of interest to invert, notably those characterising the source, called the control vector and  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N_{\text{obs}}}$  the set of available observations :

$$\underbrace{p(\mathbf{x}|\mathbf{y})}_{\text{posterior}} = \frac{\overbrace{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})}^{\text{likelihood}} \overbrace{p(\mathbf{x})}^{\text{prior}}}{\underbrace{p(\mathbf{y})}_{\text{evidence}}}. \quad (\text{D.1})$$

Within this Bayesian framework, the aim is to reconstruct the posterior distributions of the control vector from the observations. Likelihood assess how likely are observations from a specific source are. Prior knowledge is used to compensate for the limited number of observations available for solving the problem and evidence refers to the probability of the observations. Evidence does not depend on  $\mathbf{x}$  and can therefore be seen as a constant. The latter is divided by itself in the inverse method equations, and therefore does not need to be defined.

The posterior distribution  $P_{\mathbf{y}} : \mathbf{x} \rightarrow p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  is sampled using a Markov Chain Monte Carlo (MCMC) method based on the Metropolis-Hastings algorithm (Hastings, 1970). For a given number of iterations, a new state  $\mathbf{x}_{\text{new}}$  is proposed to the system from a previous state  $\mathbf{x}_{\text{old}}$ , according to a transition probability  $g$ . This new state is either accepted or rejected. If it is accepted, the new state replaces the old one, otherwise a new state is re-proposed from the old one. Acceptance or rejection depends on a random component, an acceptance rate and the detailed balance principle (D.2) :

$$P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_{\text{new}}|\mathbf{x}_{\text{old}})P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_{\text{old}}) = P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_{\text{old}}|\mathbf{x}_{\text{new}})P_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}_{\text{new}}). \quad (\text{D.2})$$

The MCMC principle is sketched in the figure D.1. A symmetric distribution is used to define the transition probability  $g$ , which simplifies the equations. The folded normal distribution (Chakraborty and Chatterjee, 2013) is adopted for all variables of interest contained in  $\mathbf{x}$ , unless otherwise specified, in order to guarantee the positivity of the sampled variables.

The ergodicity of the MCMC process guarantees uniqueness and the detailed balance principle ensures the existence of the solution. The solution found consists of all accepted state samples of the system, giving a Monte Carlo estimate of the posterior distributions. In

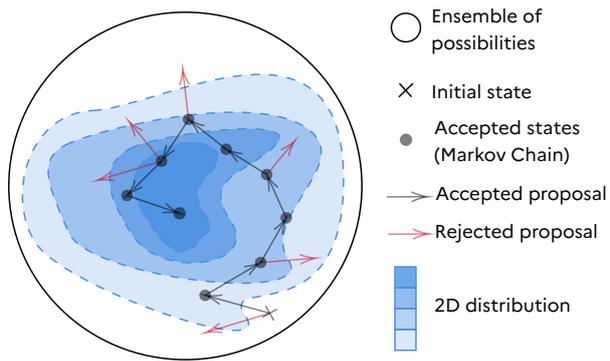


Figure D.1 – MCMC principle.

practice, only a finite number of MCMC iterations can be simulated, so the choice of initial condition can influence the quality of convergence. It is therefore necessary to ignore the first iterations of the algorithm. The most commonly used method consists of discarding (or burn-in) the first iterations before convergence which can be gauged using various diagnostics (Cowles and Carlin, 1996; Riabiz et al., 2022). The approach of performing a new inversion using the convergence values from the first inversion, for example using the last values obtained from the system, is applied within the inversion framework in order to burn-in. In addition, to limit the computation time while ensuring that the Markov chain is close to its asymptotic regime, the number of iterations used is  $2.5 \times 10^6$ , based on the tests carried out beforehand.

## D.2 Statistical indicators

Five statistical indicators are introduced : the fractional bias FB (equation (D.3a)), the normalised mean square error NMSE (equation (D.3b)), the correlation coefficient R (equation (D.3c)), the normalised absolute difference NAD (equation (D.3d)) and the fraction within a factor of two FAC2 (equation (D.3e)). FB, which is a normalisation of the value of the bias, has the advantage of providing the gross difference in values, transposable on different samples. NMSE describes the total error between the actual and simulated observations, which can also be transposed to other samples since it is standardised. R qualifies the strength of the linear link between the observation and the modelled value. NAD is the measure of the overlap between the actual and simulated observations. Finally, FAC2 represents the fraction of simulated data that agrees with the measured data to within a factor of 2.

Given that  $C_o$  represents the real observed concentrations and  $C_p$  the concentrations

estimated by  $\bar{H}$ , the statistical indicators are described as follows :

$$FB = 2 \left( \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{\overline{C_o} + \overline{C_p}} \right); \quad (D.3a)$$

$$NMSE = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})^2}{\overline{C_o} \overline{C_p}}; \quad (D.3b)$$

$$R = \frac{(\overline{C_p} - \overline{C_o})(\overline{C_m} - \overline{C_o})}{(\sigma_{C_p} \sigma_{C_o})}; \quad (D.3c)$$

$$NAD = \frac{|\overline{C_o} - \overline{C_p}|}{(\overline{C_o} + \overline{C_p})}; \quad (D.3d)$$

$$FAC2 = \text{fraction of data that satisfy : } 0,5 C_o \leq C_p \leq 2 C_o. \quad (D.3e)$$

A perfect inversion system, with no errors, will have the following scores :  $FB = 0$ ,  $NMSE = 0$ ,  $R = 1$ ,  $FAC2 = 0$ ,  $NAD = 0$ , each indicator measuring specific properties.

# Références

- Akagi, S. K., R. J. Yokelson, C. Wiedinmyer, M. J. Alvarado, J. S. Reid, T. Karl, J. D. Crouse, and P. O. Wennberg, 2011 : Emission factors for open and domestic biomass burning for use in atmospheric models. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **11 (9)**, 4039–4072, doi :10.5194/acp-11-4039-2011, URL <https://doi.org/10.5194/acp-11-4039-2011>.
- Alp, E., and R. Michalowicz, 2005 : Modeling of a warehouse fire - a case study.
- Argyropoulos, C., G. Sideris, M. Christolis, Z. Nivolianitou, and N. Markatos, 2010 : Modelling pollutants dispersion and plume rise from large hydrocarbon tank fires in neutrally stratified atmosphere. *Atmospheric Environment*, **44 (6)**, 803–813, doi :10.1016/j.atmosenv.2009.11.034, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.11.034>.
- Armand, P., O. Oldrini, C. Duchenne, and S. Perdriel, 2021 : Topical 3D modelling and simulation of air dispersion hazards as a new paradigm to support emergency preparedness and response. *Environmental Modelling and Software*, **143**, 105 129, doi :10.1016/j.envsoft.2021.105129, URL <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2021.105129>.
- ARS, 2019 : Recommandations sanitaires de l'ars du 16 mai 2019. Tech. rep., Agence régionale de santé Île-de-France, 35 rue de la gare 75935 Paris. URL <https://www.iledefrance.ars.sante.fr/incendie-notre-dame-de-paris>.
- Babrauskas, V., and R. D. Peacock, 1992 : Heat release rate : The single most important variable in fire hazard. *Fire Safety Journal*, **18 (3)**, 255–272, doi :10.1016/0379-7112(92)90019-9, URL [https://doi.org/10.1016/0379-7112\(92\)90019-9](https://doi.org/10.1016/0379-7112(92)90019-9).
- Bærentsen, J., and R. Berkowicz, 1984 : Monte carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment (1967)*, **18 (4)**, 701–712, doi :10.1016/0004-6981(84)90256-7, URL [https://doi.org/10.1016/0004-6981\(84\)90256-7](https://doi.org/10.1016/0004-6981(84)90256-7).
- Baggio, R., J. B. Filippi, B. Truchot, and F. T. Couto, 2022 : Local to continental scale coupled fire-atmosphere simulation of large industrial fire plume. *Fire Safety Journal*, **134**, 103 699, doi :10.1016/j.firesaf.2022.103699, URL <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2022.103699>.
- Barlow, J., and O. Coceal, 2009 : A review of urban roughness sublayer turbulence.
- Belcher, S. E., O. Coceal, E. V. Goulart, A. C. Rudd, and A. G. Robins, 2014 : Processes controlling atmospheric dispersion through city centres. *Journal of Fluid Mechanics*, **763**, 51–81, doi : 10.1017/jfm.2014.661, URL <https://doi.org/10.1017/jfm.2014.661>.
- Benamrane, Y., 2015 : La gestion des situations d'urgence à l'interface entre expertise et décision : quelle place pour les outils de modélisation des dispersions NRBC-E et de leurs conséquences. Theses, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

- Benamrane, Y., and G. Boustras, 2015 : Atmospheric dispersion and impact modeling systems : How are they perceived as support tools for nuclear crises management? *Safety Science*, **71**, 48–55, doi :10.1016/j.ssci.2014.09.002, URL <https://doi.org/10.1016/j.ssci.2014.09.002>.
- Blagojevic, M., and D. Pesic, 2011 : A new curve for temperature-time relationship in compartment fire. *Thermal Science*, **15 (2)**, 339–352, doi :10.2298/tsci100927021b, URL <https://doi.org/10.2298/tsci100927021b>.
- Bonazountas, M., D. Kallidromitou, P. Kassomenos, and N. Passas, 2007 : A decision support system for managing forest fire casualties. *Journal of Environmental Management*, **84 (4)**, 412–418, doi :10.1016/j.jenvman.2006.06.016, URL <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2006.06.016>.
- Booher, L. E., and B. Janke, 1997 : Air emissions from petroleum hydrocarbon fires during controlled burning. *American Industrial Hygiene Association Journal*, **58**, 359–365, URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:98273016>.
- Boppana, V. B. L., Z.-T. Xie, and I. P. Castro, 2011 : Large-eddy simulation of dispersion from line sources in a turbulent channel flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, **88 (3)**, 311–342, doi :10.1007/s10494-011-9356-x, URL <https://doi.org/10.1007/s10494-011-9356-x>.
- Briggs, G. A., 1982 : *Plume rise predictions*, chap. 3. American Meteorological Society.
- Briggs G. A., 1984 : *Plume rise and buoyancy effects*. *Atmospheric Science and Power Production*, DOE/TIC-27601, Technical Information Center, 327–366.
- Britter, R. E., and S. R. Hanna, 2003 : Flow and dispersion in urban areas. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **35 (1)**, 469–496, doi :10.1146/annurev.fluid.35.101101.161147, URL <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.35.101101.161147>.
- Brummage K. G. , 1968 : *The calculation of atmospheric dispersion from a stack*. *Atmospheric Environment*, **2 (35)**, 197–224.
- Bruno Sportisse, 2008 : *Pollution atmosphérique. Des processus à la modélisation*. Springer-Verlag France, Paris.
- Bubbico, R., G. Dusserre, and B. Mazzarotta, 2016 : Calculation of the flame size from burning liquid pools. *Chemical Engineering Transactions*, **53**, 67–72, doi :10.3303/CET1653012, URL <https://doi.org/10.3303/CET1653012>.
- Businger, J. A., J. C. Wyngaard, Y. Izumi, and E. F. Bradley, 1971 : Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **28 (2)**, 181–189, doi :10.1175/1520-0469(1971)028<0181:fprita>2.0.co;2, URL [https://doi.org/10.1175/1520-0469\(1971\)028<0181:fprita>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0469(1971)028<0181:fprita>2.0.co;2).
- Byrd, R. H., P. Lu, J. Nocedal, and C. Zhu, 1995 : A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **16 (5)**, 1190–1208, doi : 10.1137/0916069, URL <https://doi.org/10.1137/0916069>.
- Candel, S., D. Durox, S. Ducruix, A.-L. Birbaud, N. Noiray, and T. Schuller, 2009 : Flame dynamics and combustion noise : Progress and challenges. *International Journal of Aeroacoustics*, **8 (1)**, 1–56, doi :10.1260/147547209786234984, URL <https://doi.org/10.1260/147547209786234984>.

- Chakrabarty, R. K., N. D. Beres, H. Moosmüller, S. China, C. Mazzoleni, M. K. Dubey, L. Liu, and M. I. Mishchenko, 2014 : Soot superaggregates from flaming wildfires and their direct radiative forcing. *Scientific Reports*, **4** (1), doi :10.1038/srep05508, URL <https://doi.org/10.1038/srep05508>.
- Chakraborty, A. K., and M. Chatterjee, 2013 : On multivariate folded normal distribution. *Sankhyā : The Indian Journal of Statistics, Series B (2008-)*, **75** (1), 1–15, URL <http://www.jstor.org/stable/42003783>.
- Chang, J. C., and S. R. Hanna, 2004 : Air quality model performance evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, **87** (1-3), doi :10.1007/s00703-003-0070-7, URL <https://doi.org/10.1007/s00703-003-0070-7>.
- Chatris, J., J. Quintela, J. Folch, E. Planas, J. Arnaldos, and J. Casal, 2001 : Experimental study of burning rate in hydrocarbon pool fires. *Combustion and Flame*, **126** (1-2), 1373–1383, doi :10.1016/s0010-2180(01)00262-0, URL [https://doi.org/10.1016/s0010-2180\(01\)00262-0](https://doi.org/10.1016/s0010-2180(01)00262-0).
- Chen, Y.-C., and Coauthors, 2023 : Using drone soundings to study the impacts and compositions of plumes from a gigantic coal-fired power plant. *Science of The Total Environment*, **893**, 164 709, doi :10.1016/j.scitotenv.2023.164709, URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.164709>.
- Chen, Z., and Coauthors, 2020 : Influence of meteorological conditions on PM2.5 concentrations across china : A review of methodology and mechanism. *Environment International*, **139**, 105 558, doi :10.1016/j.envint.2020.105558, URL <https://doi.org/10.1016/j.envint.2020.105558>.
- Cho, Y., J. Kim, J. Lee, M. Choi, H. Lim, S. Lee, and J. Im, 2023 : Fine particulate concentrations over east asia derived from aerosols measured by the advanced himawari imager using machine learning. *Atmospheric Research*, **290**, 106 787, doi :10.1016/j.atmosres.2023.106787, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2023.106787>.
- Chow, F. K., B. Kosović, and S. Chan, 2008 : Source inversion for contaminant plume dispersion in urban environments using building-resolving simulations. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **47** (6), 1553–1572, doi :10.1175/2007jamc1733.1, URL <https://doi.org/10.1175/2007jamc1733.1>.
- Christian, T. J., 2003 : Comprehensive laboratory measurements of biomass-burning emissions : 1. emissions from indonesian, african, and other fuels. *Journal of Geophysical Research*, **108** (D23), doi :10.1029/2003jd003704, URL <https://doi.org/10.1029/2003jd003704>.
- Coceal, O., E. V. Goulart, S. Branford, T. Glyn Thomas, and S. E. Belcher, 2014 : Flow structure and near-field dispersion in arrays of building-like obstacles. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, **125**, 52–68, doi :10.1016/j.jweia.2013.11.013, URL <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2013.11.013>.
- Coceal, O., T. G. Thomas, I. P. Castro, and S. E. Belcher, 2006 : Mean flow and turbulence statistics over groups of urban-like cubical obstacles. *Boundary-Layer Meteorology*, **121** (3), 491–519, doi :10.1007/s10546-006-9076-2, URL <https://doi.org/10.1007/s10546-006-9076-2>.
- Costes, A., M. C. Rochoux, C. Lac, and V. Masson, 2021 : Subgrid-scale fire front reconstruction for ensemble coupled atmosphere-fire simulations of the FireFlux i experiment. *Fire Safety Journal*, **126**, 103 475, doi :10.1016/j.firesaf.2021.103475.

- Cowles, M. K., and B. P. Carlin, 1996 : Markov chain monte carlo convergence diagnostics : A comparative review. *Journal of the American Statistical Association*, **91 (434)**, 883–904, doi : 10.1080/01621459.1996.10476956, URL <https://doi.org/10.1080/01621459.1996.10476956>.
- Cox, G., and R. Chitty, 1985 : Some source-dependent effects of unbounded fires. *Combustion and Flame*, **60 (3)**, 219–232, doi :10.1016/0010-2180(85)90027-6, URL [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(85\)90027-6](https://doi.org/10.1016/0010-2180(85)90027-6).
- COX, G., and S. KUMAR, 1987 : Field modelling of fire in forced ventilated enclosures. *Combustion Science and Technology*, **52 (1-3)**, 7–23, doi :10.1080/00102208708952565, URL <https://doi.org/10.1080/00102208708952565>, <https://doi.org/10.1080/00102208708952565>.
- Cultrera, A., and L. Callegaro, 2020 : A simple algorithm to find the l-curve corner in the regularisation of ill-posed inverse problems. *IOP SciNotes*, **1 (2)**, 025 004, doi :10.1088/2633-1357/abad0d, URL <https://doi.org/10.1088/2633-1357/abad0d>.
- Daly, A., P. Zannetti, and T. Echehki, 2012 : A combination of fire and dispersion modeling techniques for simulating a warehouse fire. *International Journal of Safety and Security Engineering*, **2**, 368–380, doi :10.2495/SAFE-V2-N4-368-380.
- DeCarlo, P. F., J. G. Slowik, D. R. Worsnop, P. Davidovits, and J. L. Jimenez, 2004 : Particle morphology and density characterization by combined mobility and aerodynamic diameter measurements. part 1 : Theory. *Aerosol Science and Technology*, **38 (12)**, 1185–1205, doi : 10.1080/027868290903907, URL <https://doi.org/10.1080/027868290903907>.
- Defforge, C., 2019 : Data assimilation for micrometeorological applications with the fluid dynamics model Code\_Saturne. Theses, Université Paris-Est, URL <https://theses.hal.science/tel-02318713>.
- Dowling, A. P., and Y. Mahmoudi, 2015 : Combustion noise. *Proceedings of the Combustion Institute*, **35 (1)**, 65–100, doi :10.1016/j.proci.2014.08.016, URL <https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.08.016>.
- Dumont Le Brazidec, J., M. Bocquet, O. Saunier, , and Y. Roustan, 2021 : Quantification of the modelling uncertainties in atmospheric release source assessment and application to the reconstruction of the autumn 2017 Ruthenium 106 source. *Atmos. Chem. Phys.*, 1–28, doi :10.5194/acp-2020-1129, URL <https://acp.copernicus.org/preprints/acp-2020-1129/>, publisher : Copernicus GmbH.
- Dumont Le Brazidec, J., M. Bocquet, O. Saunier, and Y. Roustan, 2020 : MCMC methods applied to the reconstruction of the autumn 2017 ruthenium-106 atmospheric contamination source. *Atmospheric Environment : X*, **6**, 100 071, doi :10.1016/j.aeaoa.2020.100071, URL <https://doi.org/10.1016/j.aeaoa.2020.100071>.
- Dumont Le Brazidec, J., M. Bocquet, O. Saunier, and Y. Roustan, 2023 : Bayesian transdimensional inverse reconstruction of the fukushima daiichi caesium 137 release. *Geoscientific Model Development*, **16 (3)**, 1039–1052, doi :10.5194/gmd-16-1039-2023, URL <https://doi.org/10.5194/gmd-16-1039-2023>.
- Fisher, B., 2001 : Modelling plume rise and dispersion from pool fires. *Atmospheric Environment*, **35 (12)**, 2101–2110, doi :10.1016/s1352-2310(00)00495-7, URL [https://doi.org/10.1016/s1352-2310\(00\)00495-7](https://doi.org/10.1016/s1352-2310(00)00495-7).

- Fletcher, R., 1987 : *Practical methods of optimization* : V. 1-2. 2nd ed., John Wiley & Sons, Chichester, England.
- FLUMilog, 2011 : *Description de la méthode de calcul des effets thermiques produits par un feu d'entrepôt. Partie A. Ineris, DRA-09-90977-14553A Version 2.*
- French, S., N. Argyris, S. M. Haywood, M. C. Hort, and J. Q. Smith, 2017 : Communicating geographical risks in crisis management : The need for research. *Risk Analysis*, **39** (1), 9–16, doi :10.1111/risa.12904, URL <https://doi.org/10.1111/risa.12904>.
- Gariazzo, C., and Coauthors, 2014 : Cost action es1006. evaluation, improvement and guidance of local-scale emergency prediction and response tools for airborne hazards in built environments : ongoing activities, experiments and recent results. *Chemical Engineering Transactions*, **36**, 529–534, doi :10.3303/CET1436089, URL <https://doi.org/10.3303/CET1436089>.
- Glassman, I., 1989 : Soot formation in combustion processes. *Symposium (International) on Combustion*, **22** (1), 295–311, doi :10.1016/s0082-0784(89)80036-0, URL [https://doi.org/10.1016/s0082-0784\(89\)80036-0](https://doi.org/10.1016/s0082-0784(89)80036-0).
- Groupe de Travail Dépôt de Liquides Inflammables, 2006 : *Modélisation des effets thermiques dus à un feu de nappe d'hydrocarbures liquides* 01. URL [https://aida.ineris.fr/consultation\\_document/31652](https://aida.ineris.fr/consultation_document/31652).
- Guo, Y., G. Xiao, L. Wang, C. Chen, H. Deng, H. Mi, C. Tu, and Y. Li, 2023 : Pool fire burning characteristics and risks under wind-free conditions : State-of-the-art. *Fire Safety Journal*, **136**, 103 755, doi :10.1016/j.firesaf.2023.103755.
- Hall, D. J., and A. M. Spanton, 2003 : A review of models for dispersion following fires. **403**, 123 916.
- Hanna, S., and J. Chang, 2012 : Acceptance criteria for urban dispersion model evaluation. *Meteorology and Atmospheric Physics*, **116** (3-4), 133–146, doi :10.1007/s00703-011-0177-1, URL <https://doi.org/10.1007/s00703-011-0177-1>.
- Hanna, S. R., and R. J. Paine, 1989 : Hybrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation. *Journal of Applied Meteorology*, **28** (3), 206–224, doi :10.1175/1520-0450(1989)028<0206:hpdmda>2.0.co;2, URL [https://doi.org/10.1175/1520-0450\(1989\)028<0206:hpdmda>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0450(1989)028<0206:hpdmda>2.0.co;2).
- Hanna S. R., et al, 1982 : *Handbook on atmospheric diffusion*. Technical information center U.S. Departement of Energy.
- Hansen, P. C., 2010 : *Discrete inverse problems. Insight and algorithms*. 85–108 pp., doi :10.1137/1.9780898718836.
- Hastings, W. K., 1970 : Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications. *Biometrika*, **57** (1), 97–109, doi :10.1093/biomet/57.1.97, URL <https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97>.
- Heskestad G., 1983 : *Virtual Origins of Fire Plumes*. *Fire Safety Journal*, **5**, 109–114.
- Heskestad G., 1984 : *Engineering Relation for Fire Plumes*. *Fire Safety Journal*, **7**, 25–32.

- Heskestad G., 1986 : *Fire Plume air entrainment according to two competing assumption. Twenty-first Symposium (International) on Combustion/The Comustion Institute*, 111–120.
- Hodshire, A. L., Q. Bian, E. Ramnarine, C. R. Lonsdale, M. J. Alvarado, S. M. Kreidenweis, S. H. Jathar, and J. R. Pierce, 2019 : More than emissions and chemistry : Fire size, dilution, and background aerosol also greatly influence near-field biomass burning aerosol aging. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, **124 (10)**, 5589–5611, doi :10.1029/2018jd029674, URL <https://doi.org/10.1029/2018jd029674>.
- Holland J. Z. , 1953 : *A meteorological survey of the oak ridge are*. Rapport technique. US AEC, Oak Ridge, Tennessee, **ORO-99**.
- Hua, J., K. Kumar, B. C. Khoo, and H. Xue, 2002 : A numerical study of the interaction of water spray with a fire plume. *Fire Safety Journal*, **37 (7)**, 631–657, doi :10.1016/s0379-7112(02)00026-7, URL [https://doi.org/10.1016/s0379-7112\(02\)00026-7](https://doi.org/10.1016/s0379-7112(02)00026-7).
- Huggett, C., 1980 : Estimation of rate of heat release by means of oxygen consumption measurements. *Fire and Materials*, **4 (2)**, 61–65, doi :10.1002/fam.810040202, URL <https://doi.org/10.1002/fam.810040202>.
- Hyman, D. M., and M. J. Pavolonis, 2020 : Probabilistic retrieval of volcanic SO<sub>2</sub> layer height and partial column density using the cross-track infrared sounder (CrIS). *Atmospheric Measurement Techniques*, **13 (11)**, 5891–5921, doi :10.5194/amt-13-5891-2020, URL <https://doi.org/10.5194/amt-13-5891-2020>.
- INERIS, 2019 : *Modélisation de la dispersion des particules de plomb du panache de l'incendie de Notre Dame. Rapport Technique. Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques*, **v2 (200480-879062)**.
- INERIS, 2023 : Recensement des substances toxiques susceptibles d'être émises par un incendie. *Ineris*, **203887-v4.0**.
- Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques, 2005 : *Formalisation du savoir et des outils dans le domaine des risques majeurs (DRA-35). Ω -16 Toxicité et dispersion des fumées d'incendie. Phénoménologie et modélisation des effets. Ineris*, **57149**.
- Invernizzi, M., F. Tagliaferri, S. Sironi, G. Tinarelli, and L. Capelli, 2021 : Simulating pollutant dispersion from accidental fires with a focus on source characterization. *Journal of Health and Pollution*, **11 (30)**, doi :10.5696/2156-9614-11.30.210612, URL <https://doi.org/10.5696/2156-9614-11.30.210612>.
- Janardhan, R. K., S. Shakil, M. Hassinen, W. Lu, J. Puttonen, and S. Hostikka, 2022 : Impact of firefighting sprays on the fire performance of structural steel members. *Fire Technology*, **58 (4)**, 2405–2440, doi :10.1007/s10694-022-01257-8, URL <https://doi.org/10.1007/s10694-022-01257-8>.
- Johansson, L., A. Karppinen, M. Kurppa, A. Kousa, J. V. Niemi, and J. Kukkonen, 2022 : An operational urban air quality model ENFUSER, based on dispersion modelling and data assimilation. *Environmental Modelling and Software*, **156**, 105 460, doi :10.1016/j.envsoft.2022.105460, URL <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2022.105460>.

- Kelly, F. E., and Coauthors, 2021 : Fire safety and emergency evacuation guidelines for intensive care units and operating theatres : for use in the event of fire, flood, power cut, oxygen supply failure, noxious gas, structural collapse or other critical incidents. *Anaesthesia*, **76 (10)**, 1377–1391, doi :10.1111/anae.15511, URL <https://doi.org/10.1111/anae.15511>.
- kent, J., and H. Wagner, 1984 : Who do diffusion flames emit smoke. *Combustion Science and Technology*, **41 (5-6)**, 245–269, doi :10.1080/00102208408923834, URL <https://doi.org/10.1080/00102208408923834>.
- Khan, A. A., and Coauthors, 2023 : Fire modelling framework for investigating tall building fire : A case study of the plasco building. *Case Studies in Thermal Engineering*, **45**, 103 018, doi :10.1016/j.csite.2023.103018, URL <https://doi.org/10.1016/j.csite.2023.103018>.
- Korsakissok, I., and V. Mallet, 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, doi :10.1175/2009jamc2160.1, URL <https://doi.org/10.1175/2009jamc2160.1>.
- Kovalets, I. V., G. C. Efthimiou, S. Andronopoulos, A. G. Venetsanos, C. D. Argyropoulos, and K. E. Kakosimos, 2018 : Inverse identification of unknown finite-duration air pollutant release from a point source in urban environment. *Atmospheric Environment*, **181**, 82–96, doi :10.1016/j.atmosenv.2018.03.028, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.03.028>.
- Kumar, P., S. Kumar Singh, A.-A. Feiz, and P. Ngae, 2016 : An urban scale inverse modelling for retrieving unknown elevated emissions with building-resolving simulations. *Atmospheric Environment*, **140**, 135–146, doi :10.1016/j.atmosenv.2016.05.050, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.05.050>.
- Launay, E., V. Hergault, M. Bocquet, J. Dumont Le Brazidec, and Y. Roustan, 2023 : Inverse modelling for the atmospheric dispersion of large-scale urban smoke plumes.
- Launay, E., V. Hergault, M. Bocquet, J. Dumont Le Brazidec, and Y. Roustan, 2024 : Bayesian inversion of emissions from large urban fire using in situ observations. *Atmospheric environment*, **323**, doi :10.1016/j.atmosenv.2024.120391.
- Laurent, A., A. Pey, P. Gurtel, and B. Fabiano, 2021 : A critical perspective on the implementation of the EU council seveso directives in france, germany, italy and spain. *Process Safety and Environmental Protection*, **148**, 47–74, doi :10.1016/j.psep.2020.09.064, URL <https://doi.org/10.1016/j.psep.2020.09.064>.
- Legifrance, 2020a : Arrêté du 24 septembre 2020 modifiant l'arrêté du 26 mai 2014. Prévention des accidents majeurs dans les installations classées mentionnées à la section 9, chapitre v, titre ier, du livre v du code de l'environnement. URL <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000042364424>.
- Legifrance, 2020b : 2020-1168. Règles applicables aux installations dans lesquelles des substances dangereuses sont présentes dans des quantités telles qu'elles peuvent être à l'origine d'accidents majeurs. URL <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000042364321>.
- Lemieux, P. M., C. C. Lutes, and D. A. Santoianni, 2004 : Emissions of organic air toxics from open burning : a comprehensive review. *Progress in Energy and Combustion Science*, **30 (1)**, 1–32, doi :10.1016/j.pecs.2003.08.001, URL <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2003.08.001>.

- Li, K., and Coauthors, 2021 : A simple data assimilation method to improve atmospheric dispersion based on lagrangian puff model. *Nuclear Engineering and Technology*, **53 (7)**, 2377–2386, doi :10.1016/j.net.2021.01.032, URL <https://doi.org/10.1016/j.net.2021.01.032>.
- Li, S., C. Zhou, and M. Qu, 2023 : Spatiotemporal variations and mechanism of PM2.5 pollution in urban area : The case of guiyang, guizhou, china. *Journal of Environmental Management*, **341**, 118 030, doi :10.1016/j.jenvman.2023.118030, URL <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2023.118030>.
- Lintis, L., 2018 : Étude des phénomènes de sorption de l'eau sur des aérosols solides émis lors d'un incendie : identification des paramètres physico-chimiques d'influence. Theses, Université de Lorraine, URL <https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02130021>.
- Lipsett, M., K. Waller, D. Shusterman, S. Thollaug, and W. Brunner, 1994 : The respiratory health impact of a large urban fire. *American Journal of Public Health*, **84 (3)**, 434–438, doi :10.2105/ajph.84.3.434, URL <https://doi.org/10.2105/ajph.84.3.434>.
- Liu, Y., J.-M. Haussaire, M. Bocquet, Y. Roustan, O. Saunier, and A. Mathieu, 2017 : Uncertainty quantification of pollutant source retrieval : comparison of bayesian methods with application to the chernobyl and fukushima daiichi accidental releases of radionuclides. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **143 (708)**, 2886–2901, doi :10.1002/qj.3138, URL <https://doi.org/10.1002/qj.3138>.
- Louis, J.-F., 1979 : A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, **17 (2)**, 187–202, doi :10.1007/bf00117978.
- Mack, A., S. Ruiz-Pérez, and H. Boot, 2023 : Extension of the EFFECTS dispersion model for buoyant plume rise including lift-off. *Process Safety and Environmental Protection*, **176**, 747–762, doi :10.1016/j.psep.2023.06.053, URL <https://doi.org/10.1016/j.psep.2023.06.053>.
- Malardel, S., 2009 : *Fondamentaux de Météorologie*. 2nd ed., Cépaduès-Éditions.
- Mallia, D., A. Kochanski, S. Urbanski, and J. Lin, 2018 : Optimizing smoke and plume rise modeling approaches at local scales. *Atmosphere*, **9 (5)**, 166, doi :10.3390/atmos9050166, URL <https://doi.org/10.3390/atmos9050166>.
- Marro, M., P. Salizzoni, F. X. Cierco, I. Korsakissok, E. Danzi, and L. Soulhac, 2013 : Plume rise and spread in buoyant releases from elevated sources in the lower atmosphere. *Environmental Fluid Mechanics*, **14 (1)**, 201–219, doi :10.1007/s10652-013-9300-9, URL <https://doi.org/10.1007/s10652-013-9300-9>.
- Marshall, N. R., 1986 : Air entrainment into smoke and hot gases in open shafts. *Fire safety journal*, **10 (1)**, 37–46, URL <http://dx.doi.org/>.
- Martin, M. V., R. A. Kahn, J. A. Logan, R. Paugam, M. Wooster, and C. Ichoku, 2012 : Space-based observational constraints for 1-d fire smoke plume-rise models. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, **117 (D22)**, n/a–n/a, doi :10.1029/2012jd018370, URL <https://doi.org/10.1029/2012jd018370>.
- Matheislova, H., M. Jahoda, T. Kundrata, and O. Dvock, 2010 : Cfd simulations of compartment fires. *Chemical Engineering Transactions*, **21**, 1117–1122, doi :10.3303/CET1021187, URL <https://doi.org/10.3303/CET1021187>.

- McCaffrey, B., 1983 : Momentum implications for buoyant diffusion flames. *Combustion and Flame*, **52**, 149–167, doi :10.1016/0010-2180(83)90129-3, URL [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(83\)90129-3](https://doi.org/10.1016/0010-2180(83)90129-3).
- McGrattan, K. B., and G. P. Forney, 2000 : Fire dynamics simulator- user's manual. Tech. rep. doi :10.6028/nist.ir.6469.
- Mills M.T, 1987 : Modelling the release and dispersion of toxic combustion products from chemical fires. *International Conference on Vapor Cloud Modelling*.
- Möller, U., and G. Schumann, 1970 : Mechanisms of transport from the atmosphere to the earth's surface. *Journal of Geophysical Research*, **75 (15)**, 3013–3019, doi :10.1029/jc075i015p03013, URL <https://doi.org/10.1029/jc075i015p03013>.
- Monin, A., 1959 : On the boundary condition on the earth surface for diffusing pollution. *Advances in Geophysics Volume 6*, Elsevier, 435–436, doi :10.1016/s0065-2687(08)60131-4.
- Moon, K., J.-M. Hwang, B.-G. Kim, C. Lee, and J. il Choi, 2014 : Large-eddy simulation of turbulent flow and dispersion over a complex urban street canyon. *Environmental Fluid Mechanics*, **14 (6)**, 1381–1403, doi :10.1007/s10652-013-9331-2, URL <https://doi.org/10.1007/s10652-013-9331-2>.
- Moussafir, J., O. Oldrini, G. Tinarelli, and J. Sontowski, 2004 : 5.26 a new operational approach to deal with dispersion around obstacles : The mss (micro swift spray) software suite. *Proceedings of the 9th Int'l Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes*, **2**.
- MUNOZ, M., J. ARNALDOS, J. CASAL, and E. PLANAS, 2004 : Analysis of the geometric and radiative characteristics of hydrocarbon pool fires. *Combustion and Flame*, **139 (3)**, 263–277, doi :10.1016/j.combustflame.2004.09.001, URL <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.09.001>.
- National Fire Protection Association, Society of Fire Protection Engineers, 2016 : *Fire Plumes, Flame Height, and Air Entrainment. SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, 5th ed., Springer, 396–425.
- Nguyen, C. V., and L. Soulhac, 2016 : Evaluation of data assimilation method at the urban scale with the sirane model.
- Niranjan, R., and A. K. Thakur, 2017 : The toxicological mechanisms of environmental soot (black carbon) and carbon black : Focus on oxidative stress and inflammatory pathways. *Frontiers in Immunology*, **8**, doi :10.3389/fimmu.2017.00763, URL <https://doi.org/10.3389/fimmu.2017.00763>.
- Oldrini, O., P. Armand, C. Duchenne, C. Olry, J. Moussafir, and G. Tinarelli, 2017 : Description and preliminary validation of the PMSS fast response parallel atmospheric flow and dispersion solver in complex built-up areas. *Environmental Fluid Mechanics*, **17 (5)**, 997–1014, doi :10.1007/s10652-017-9532-1.
- Olenick, S. M., 2003 : An updated international survey of computer models for fire and smoke. *Journal of Fire Protection Engineering*, **13 (2)**, 87–110, doi :10.1177/1042391503013002001, URL <https://doi.org/10.1177/1042391503013002001>.

- Ouf, F.-X., S. Bourrous, C. Vallières, J. Yon, and L. Lintis, 2019 : Specific surface area of combustion emitted particles : Impact of primary particle diameter and organic content. *Journal of Aerosol Science*, **137**, 105–136, doi :10.1016/j.jaerosci.2019.105436.
- Petrenko, M., R. Kahn, M. Chin, and J. Limbacher, 2017 : Refined use of satellite aerosol optical depth snapshots to constrain biomass burning emissions in the gocart model. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, **122 (20)**, doi :10.1002/2017jd026693, URL <http://dx.doi.org/10.1002/2017JD026693>.
- Raj, P. K., 2007 : LNG fires : A review of experimental results, models and hazard prediction challenges. *Journal of Hazardous Materials*, **140 (3)**, 444–464, doi :10.1016/j.jhazmat.2006.10.029, URL <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2006.10.029>.
- Ratto, C., R. Festa, C. Romeo, O. Frumento, and M. Galluzzi, 1994 : Mass-consistent models for wind fields over complex terrain : The state of the art. *Environmental Software*, **9 (4)**, 247–268, doi :10.1016/0266-9838(94)90023-x, URL [http://dx.doi.org/10.1016/0266-9838\(94\)90023-X](http://dx.doi.org/10.1016/0266-9838(94)90023-X).
- Riabiz, M., W. Y. Chen, J. Cockayne, P. Swietach, S. A. Niederer, L. Mackey, and C. J. Oates, 2022 : Optimal thinning of MCMC output. *Journal of the Royal Statistical Society Series B : Statistical Methodology*, **84 (4)**, 1059–1081, doi :10.1111/rssb.12503, URL <https://doi.org/10.1111/rssb.12503>.
- Robert, C. P., and G. Casella, 1999 : The metropolis—hastings algorithm. *Springer Texts in Statistics*, Springer New York, 231–283, doi :10.1007/978-1-4757-3071-5\_6, URL [https://doi.org/10.1007/978-1-4757-3071-5\\_6](https://doi.org/10.1007/978-1-4757-3071-5_6).
- Rodean, H. C., 1996 : *Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion*. American Meteorological Society, doi :10.1007/978-1-935704-11-9, URL <https://doi.org/10.1007/978-1-935704-11-9>.
- Rotach, M. W., 2001 : Simulation of urban-scale dispersion using a lagrangian stochastic dispersion model. *Boundary-Layer Meteorology*, **99 (3)**, 379–410, doi :10.1023/a:1018973813500, URL <https://doi.org/10.1023/a:1018973813500>.
- Roux, G. L., and Coauthors, 2023 : Lead from notre-dame fire plume caught 15 km from paris. *ACS Earth and Space Chemistry*, **7 (2)**, 310–314, doi :10.1021/acsearthspacechem.2c00321, URL <https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.2c00321>.
- Rouïl, L., F. Tognet, F. Meleux, A. Colette, G. Leroy, and B. Truchot, 2021 : Dispersion and impact of smoke plumes from industrial fires : the case of lubrizol. *Environnement Risques Santé*, **20 (2)**, 126–133, doi :10.1684/ers.2021.1540, URL <https://doi.org/10.1684/ers.2021.1540>.
- Röckle, R., 1990 : *Bestimmung Der Strömungsverhältnisse Im Bereich Komplexer Bebauungsstrukturen*. Ph.D. thesis.
- Sakamoto, K. M., J. R. Laing, R. G. Stevens, D. A. Jaffe, and J. R. Pierce, 2016 : The evolution of biomass-burning aerosol size distributions due to coagulation : dependence on fire and meteorological details and parameterization. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **16 (12)**, 7709–7724, doi :10.5194/acp-16-7709-2016, URL <https://doi.org/10.5194/acp-16-7709-2016>.
- Sehmel, G. A., 1980 : Particle and gas dry deposition : A review. *Atmospheric Environment (1967)*, **14 (9)**, 983–1011, doi :10.1016/0004-6981(80)90031-1.

- Sehmel, G. A., and W. H. Hodgson, 1978 : Model for predicting dry deposition of particles and gases to environmental surfaces. URL <https://www.osti.gov/biblio/6717982>.
- Seigneur, C., 2018 : *Pollution atmosphérique. Concepts, théorie et applications.*, 279–306. Éditions Belin/Humensis.
- Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 2016 : *Atmospheric Diffusion. Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to Climate Change.*, 3rd ed., Wiley, 763–825.
- Seity, Y., P. Brousseau, S. Malardel, G. Hello, P. Bénard, F. Bouttier, C. Lac, and V. Masson, 2011 : The arome-france convective-scale operational model. *Monthly weather review*, **139** (3), 976–991.
- Sipkens, T. A., A. Boies, J. C. Corbin, R. K. Chakrabarty, J. Olfert, and S. N. Rogak, 2023 : Overview of methods to characterize the mass, size, and morphology of soot. *Journal of Aerosol Science*, **173**, 106 211, doi :10.1016/j.jaerosci.2023.106211, URL <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2023.106211>.
- Soulhac, L., G. Lamaison, F.-X. Cierco, N. B. Salem, P. Salizzoni, P. Mejean, P. Armand, and L. Patryl, 2016 : SIRANERISK : Modelling dispersion of steady and unsteady pollutant releases in the urban canopy. *Atmospheric Environment*, **140**, 242–260, doi :10.1016/j.atmosenv.2016.04.027, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.04.027>.
- Steinhaus, T., S. Welch, R. Carvel, and J. Torero, 2007 : Large-scale pool fires. *Thermal Science*, **11** (2), 101–118, doi :10.2298/tsci0702101s, URL <https://doi.org/10.2298/tsci0702101s>.
- Stull, R. B., 1988 : *An introduction to boundary layer meteorology.* 1988th ed., Atmospheric and Oceanographic Sciences Library, Kluwer Academic, Dordrecht, Netherlands.
- Swuste, P., and G. Reniers, 2017 : Seveso inspections in the european low countries history, implementation, and effectiveness of the european seveso directives in belgium and the netherlands. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, **49**, 68–77, doi :10.1016/j.jlp.2016.11.006, URL <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2016.11.006>.
- Tarantola, A., 2005 : *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation.* Society for Industrial and Applied Mathematics, doi :10.1137/1.9780898717921, URL <https://doi.org/10.1137/1.9780898717921>.
- Thomas, P., 1963 : The size of flames from natural fires. *Symposium (International) on Combustion*, **9** (1), 844–859, doi :10.1016/s0082-0784(63)80091-0.
- Tilloy, A., V. Mallet, D. Poulet, C. Pesin, and F. Brocheton, 2013 : Blue-based no 2 data assimilation at urban scale. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, **118**, doi :10.1002/jgrd.50233.
- Tinarelli, G., G. Brusasca, O. Oldrini, D. Anfossi, S. T. Castelli, and J. Moussafir, 2007 : Micro-swift-spray (mss) : A new modelling system for the simulation of dispersion at microscale. general description and validation. *Air Pollution Modeling and Its Application XVII*, C. Borrego, and A.-L. Norman, Eds., Springer US, Boston, MA, 449–458.

- Tinarelli, G., L. Mortarini, S. T. Castelli, G. Carlino, J. Moussafir, C. Olry, P. Armand, and D. Anfossi, 2013 : Review and validation of MicroSpray, a lagrangian particle model of turbulent dispersion. *Lagrangian Modeling of the Atmosphere*, American Geophysical Union, 311–328, doi :10.1029/2012gm001242.
- Tohidi, A., and N. B. Kaye, 2016 : Highly buoyant bent-over plumes in a boundary layer. *Atmospheric Environment*, **131**, 97–114, doi :10.1016/j.atmosenv.2016.01.046, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.046>.
- Trini Castelli, S., P. Armand, G. Tinarelli, C. Duchenne, and M. Nibart, 2018 : Validation of a lagrangian particle dispersion model with wind tunnel and field experiments in urban environment. *Atmospheric Environment*, **193**, 273–289, doi :10.1016/j.atmosenv.2018.08.045, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.08.045>.
- Turner, D. B., 2020 : *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*. CRC Press, doi :10.1201/9780138733704, URL <https://doi.org/10.1201/9780138733704>.
- van Donkelaar, A., R. V. Martin, M. Brauer, R. Kahn, R. Levy, C. Verduzco, and P. J. Villeneuve, 2010 : Global estimates of ambient fine particulate matter concentrations from satellite-based aerosol optical depth : Development and application. *Environmental Health Perspectives*, **118 (6)**, 847–855, doi :10.1289/ehp.0901623, URL <https://doi.org/10.1289/ehp.0901623>.
- van Geen, A., Y. Yao, T. Ellis, and A. Gelman, 2020 : Fallout of lead over paris from the 2019 notre-dame cathedral fire. *GeoHealth*, **4**, doi :10.1029/2020GH000279.
- Vautard, R., and Coauthors, 2007 : The dispersion of the buncefield oil fire plume : An extreme accident without air quality consequences. *Atmospheric Environment*, **41 (40)**, 9506–9517, doi :10.1016/j.atmosenv.2007.08.055, URL <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2007.08.055>.
- Venkatram, A., and J. Pleim, 1999 : The electrical analogy does not apply to modeling dry deposition of particles. *Atmospheric Environment*, **33 (18)**, 3075–3076, doi :10.1016/s1352-2310(99)00094-1, URL [https://doi.org/10.1016/s1352-2310\(99\)00094-1](https://doi.org/10.1016/s1352-2310(99)00094-1).
- Vigne, G., C. Gutierrez-Montes, A. Cantizano, W. Węgrzyński, and G. Rein, 2018 : Review and validation of the current smoke plume entrainment models for large-volume buildings. *Fire Technology*, **55 (3)**, 789–816, doi :10.1007/s10694-018-0801-4, URL <https://doi.org/10.1007/s10694-018-0801-4>.
- Wahba, G., D. R. Johnson, F. Gao, and J. Gong, 1995 : Adaptive tuning of numerical weather prediction models : Randomized GCV in three- and four-dimensional data assimilation. *Monthly Weather Review*, **123 (11)**, 3358–3370, doi :10.1175/1520-0493(1995)123<3358:atonwp>2.0.co;2, URL [https://doi.org/10.1175/1520-0493\(1995\)123<3358:atonwp>2.0.co;2](https://doi.org/10.1175/1520-0493(1995)123<3358:atonwp>2.0.co;2).
- Wang, Y., K. N. Sartelet, M. Bocquet, and P. Chazette, 2013 : Assimilation of ground versus lidar observations for pm10 forecasting. *Atmospheric Chemistry and Physics*, **13 (1)**, 269–283, doi :10.5194/acp-13-269-2013, URL <http://dx.doi.org/10.5194/acp-13-269-2013>.
- Węgrzyński, W., G. Krajewski, G. Kimbar, and T. Lipecki, 2023 : Fire smoke dispersion inside and outside of a warehouse building in moderate and strong wind conditions. *Fire Safety Journal*, **136**, 103 760, doi :10.1016/j.firesaf.2023.103760, URL <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2023.103760>.

- Wieringa, J., 1981 : Estimation of mesoscale and local-scale roughness for atmospheric transport modeling. *Air Pollution Modeling and Its Application I*, Springer US, 279–295, doi : 10.1007/978-1-4613-3344-9\_18, URL [https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3344-9\\_18](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3344-9_18).
- Winiarek, V., M. Bocquet, N. Duhanyan, Y. Roustan, O. Saunier, and A. Mathieu, 2014 : Estimation of the caesium-137 source term from the fukushima daiichi nuclear power plant using a consistent joint assimilation of air concentration and deposition observations. *Atmospheric Environment*, **82**, 268–279, doi :<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2013.10.017>.
- Winiarek, V., M. Bocquet, O. Saunier, and A. Mathieu, 2012 : Estimation of errors in the inverse modeling of accidental release of atmospheric pollutant : Application to the reconstruction of the cesium-137 and iodine-131 source terms from the fukushima daiichi power plant (vol 117, d18118, 2012). *Journal of Geophysical Research (Atmospheres)*, **117**, 18 118–, doi :10.1029/2012JD018107.
- Winiarek, V., J. Vira, M. Bocquet, M. Sofiev, and O. Saunier, 2011 : Towards the operational estimation of a radiological plume using data assimilation after a radiological accidental atmospheric release. *Atmospheric Environment*, **45 (17)**, 2944–2955, doi :<https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.12.025>, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231010010514>.
- Xie, Z.-T., and I. P. Castro, 2008 : Efficient generation of inflow conditions for large eddy simulation of street-scale flows. *Flow, Turbulence and Combustion*, **81 (3)**, 449–470, doi : 10.1007/s10494-008-9151-5, URL <https://doi.org/10.1007/s10494-008-9151-5>.
- Xu, Q., A. L. Westerling, and W. J. Baldwin, 2022 : Spatial and temporal patterns of wildfire burn severity and biomass burning-induced emissions in california. *Environmental Research Letters*, **17 (11)**, 115 001, doi :10.1088/1748-9326/ac9704, URL <https://doi.org/10.1088/1748-9326/ac9704>.
- Yao, J., M. Brauer, and S. B. Henderson, 2013 : Evaluation of a wildfire smoke forecasting system as a tool for public health protection. *Environmental Health Perspectives*, **121 (10)**, 1142–1147, doi :10.1289/ehp.1306768, URL <https://doi.org/10.1289/ehp.1306768>.
- Zhang, L., 2001 : A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module. *Atmospheric Environment*, **35 (3)**, 549–560, doi :10.1016/s1352-2310(00)00326-5.
- Zidikheri, M. J., C. Lucas, and R. J. Potts, 2018 : Quantitative verification and calibration of volcanic ash ensemble forecasts using satellite data. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, **123 (8)**, 4135–4156, doi :10.1002/2017jd027740, URL <https://doi.org/10.1002/2017jd027740>.
- Zonato, C., A. Vidili, R. Pastorino, and D. D. Faveri, 1993 : Plume rise of smoke coming from free burning fires. *Journal of Hazardous Materials*, **34 (1)**, 69–79, doi :10.1016/0304-3894(93)87004-d.
- Zukoski, E., 1986 : Fluid dynamic aspects of room fires. *Fire Safety Science*, **1**, 1–30, doi :10.3801/iafss.fss.1-1.