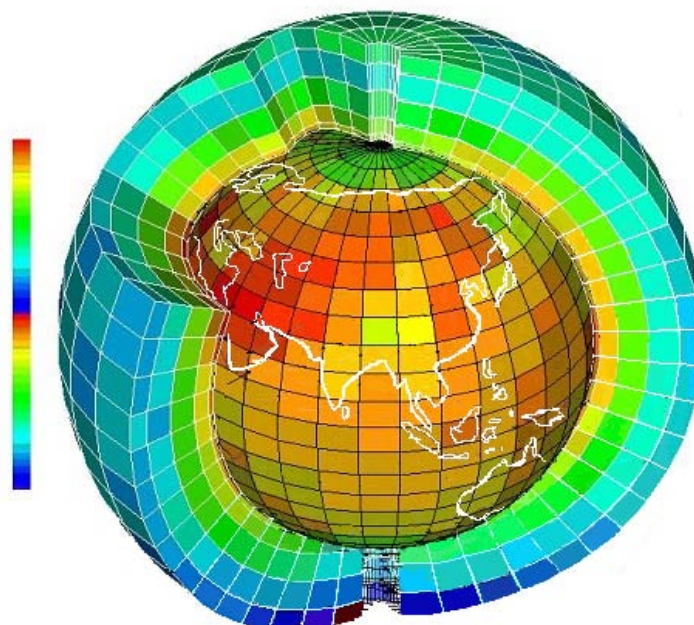


Rapport de stage Ingénieur Numéricien

« Simulation du transport de polluants atmosphériques sur le globe »



Soutenu par **Canelle SOUMARÉ**

Organisme : CEREÀ (EDF R&D ENPC)

Tuteur Sup Galilée : Olivier LAFITTE

Maîtres de stage : Jérôme DREVET
Florian COUVIDAT

3A MACS - Sup Galilée

3A MIM - Centrale Marseille

Master EDP et CS - Université Aix-Marseille

Septembre 2013

Remerciements

Je tiens à tout d'abord à remercier chaleureusement mes maîtres de stage, messieurs Jérôme DREVET et Florian COUVIDAT, pour leur grande disponibilité à mon égard, pour leur confiance, et pour leurs conseils qui m'ont permis d'organiser mon travail tout au long du stage.

Je me dois également de remercier Luc MUSSON-GENON et Denis WENDUM, pour leur disponibilité et leur aide.

J'adresse, de même, mes remerciements aux autres membres du CEREAA, pour leur accueil chaleureux, et pour l'intérêt qu'ils m'ont porté durant le stage.

Je remercie enfin, mon tuteur de stage M. Olivier LAFITTE, pour son encadrement et ses précieuses remarques durant cette expérience.

Résumé

Le CERECA (Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique) développe la plate-forme de modélisation atmosphérique nommée Polyphemus qui s'appuie sur le modèle de Chimie-Transport Eulérien Polair3D. Ce modèle permet d'estimer les concentrations de polluants dans l'atmosphère à l'échelle continentale (Europe et Asie) ou à l'échelle régionale (région Île-de-France). Pour certains polluants tels que le mercure ou les polluants organiques persistants (POP) qui sont transportés sur de longues distances, il serait intéressant de suivre leur formation et leur évolution dans l'atmosphère. Le stage que j'ai effectué consiste à étendre le modèle Polair3D à l'échelle du globe terrestre.

En outre, le système de coordonnées utilisé pour les grandes échelles dans le modèle Polair3D introduit des singularités aux pôles géographiques. Ces singularités sont à l'origine de contraintes concernant l'extension du modèle à l'échelle globale. Deux méthodes permettant d'amoindrir ces contraintes ont été implémentées dans le modèle Polair3D puis testées pour différentes configurations.

Mots clés : Modèle de Chimie-Transport, advection, condition CFL, méthodes numériques, model global.

Abstract

CERECA (Centre for Education and Research in Atmospheric Environment) develops modeling platform Polyphemus which is based on the eulerian Chemistry-Transport model Polair3D. This model is used to estimate pollutant concentrations in the atmosphere at a continental scale (Europe or Asia) or regional scale (Ile-de-France). However, for some pollutants such as mercury and persistent organic pollutants (POPs) that are transported over long distances, it would be interesting to follow their training and development in the atmosphere. My internship is therefore the extension of Polair3D model on a global scale.

The coordinate system used for large scale in Polair3D model introduces singularities at the geographic poles. These singularities are the source of constraints on the extension of the model on a global scale. Two methods to reduce these constraints have been implemented in the model Polair3D then tested for different configurations.

Keys words : Chemical-Transport Model, advection, CFL condition, numerical methods, global model.

Table des matières

1 INTRODUCTION	5
2 PRÉSENTATION DE L'ORGANISME ET DE LA MISSION	6
2.1 Le CEREAS	6
2.1.1 Historique et organisation	6
2.1.2 Thèmes de recherches	6
2.1.3 Partenariats	7
2.2 Description de la mission	7
2.2.1 Le contexte	7
2.2.2 La mission	7
3 MODÉLISATION DE LA QUALITÉ DE L'AIR	8
3.1 Structure et composition de l'atmosphère	8
3.1.1 Les couches atmosphériques	8
3.1.2 Composition de l'atmosphère	9
3.1.3 Les principaux polluants	9
3.2 Les processus atmosphériques	9
3.2.1 Emissions	10
3.2.2 Les dépôts	10
3.2.3 Chimie de l'atmosphère	11
3.2.4 Le transport	11
3.3 Les équations	12
3.3.1 Représentation de la turbulence	12
3.3.2 Equation de dispersion réactive	13
3.3.3 Conditions limites	13
4 LE MODÈLE POLAIR3D	14
4.1 La structure de la plateforme de modélisation	14
4.1.1 Préprocessing.	14
4.1.2 Processing	14
4.1.3 Postprocessing	15
4.1.4 Le module transport	15
4.2 Intégration numérique de l'advection	16
4.2.1 Equation et coordonnées	16
4.2.2 Le schéma numérique	17
4.2.3 Les propriétés du schéma	19
4.2.4 Les contraintes de la modélisation globale	20
5 LES MOTIVATIONS DU STAGE	21
5.1 Modélisation globale de polluants	21
5.1.1 Les Polluants Organiques Persistants (POP)	21
5.1.2 Le mercure	21
5.1.3 Le méthane	22
5.2 Incertitudes des conditions limites	22
5.2.1 Origine des incertitudes	22
5.2.2 Conditions limites de l'ozone	23
6 MÉTHODES EXPLORÉES ET TESTS	24
6.1 Les méthodes éliminées	24
6.1.1 Les maillages non structurés	24
6.1.2 Projection stéréographique	24
6.1.3 Recouvrement de domaines	25
6.2 Adaptation du schéma numérique	27

6.2.1	Le schéma	27
6.2.2	Le cas test	28
6.2.3	Résultats	29
6.3	Méthode de la "calotte polaire"	35
6.3.1	Le principe	35
6.3.2	Comparaison des deux méthodes	35
6.4	Etude des vents maximum et CFL	38
6.4.1	Etude des vents	38
6.4.2	Adaptation du pas de temps pour respecter la CFL	39
6.5	Construction d'un maillage réduit	40
6.5.1	Le maillage	40
6.5.2	Compatibilité entre les modules	41
6.5.3	Un schéma adapté	42
6.5.4	Le cas test	44
6.5.5	Etude de la CFL	47
6.6	Simulation de la dispersion du méthane sur le globe terrestre	48
6.6.1	Sources du méthane	48
6.6.2	Puits du méthane	49
6.6.3	Les caractéristiques de la simulation	50
6.6.4	Les résultats de la simulation	51
7	CONCLUSION	53
	Bibliographie	54
8	Annexe	55
8.1	Vent rigidifiant	55
8.2	Algorithme de construction du maillage réduit	56

1 INTRODUCTION

L'air est plus ou moins contaminé par des polluants - gazeux, liquides ou solides - d'origine naturelle (émissions provenant de la végétation, des océans, des volcans...), ou artificielle (cheminées d'usines, pots d'échappements...). Le degré de concentration de ces polluants au voisinage du sol altère la pureté de l'air, et peut entraîner des effets nocifs pour la santé humaine ou pour l'environnement. La qualité de l'air est donc décrite objectivement par les concentrations de polluants dans les basses couches de l'atmosphère. Ces concentrations fluctuent sous l'effet des apports de polluants et des nombreux phénomènes physiques et chimiques se produisant dans ce domaine. Des modèles déterministes, dits de Chimie-Transport, tentent de décrire mathématiquement ces processus afin de calculer l'évolution des concentrations de polluants.

J'ai effectué mon stage au Centre de Recherche et d'Enseignement en Environnement Atmosphérique (CEREA), dont les activités sont centrées sur la modélisation de la qualité de l'air. Le modèle de Chimie-Transport développé et utilisé au CEREA s'appelle Polair3D. Il permet de simuler et de suivre la dispersion de polluants dans l'atmosphère aux échelles continentale et régionale. Cependant, certains polluants se caractérisent par des durées de vie longues dans l'atmosphère. Les échelles régionale et continentale ne sont alors pas adaptées à la simulation de ces polluants, car ils peuvent être transportés sur de longues distances. Il est donc nécessaire, afin de modéliser correctement l'impact de ces composés sur l'environnement et la santé, de simuler leur formation et leur transport dans l'atmosphère à l'échelle globale. Ceci n'était jusqu'alors pas possible avec le modèle Polair3D. L'objectif de mon stage est donc de permettre la simulation du transport de polluants à l'échelle globale avec Polair3D.

Pour étendre ces nouvelles fonctionnalités, des méthodes numériques ont dû être recherchées puis implémentées dans le modèle Polair3D. Cependant, ces méthodes doivent être compatibles avec les spécificités de Polair3D; et en particulier avec le système de coordonnées « géographiques » utilisé par le modèle pour les grandes échelles. Cette spécificité restreint la sélection de méthodes d'une part ; et d'autre part elle introduit une singularité du maillage qui risque d'entraîner des instabilités numériques. Le choix des méthodes développées a ainsi été conditionné par ces contraintes. Différentes méthodes ont donc été implémentées puis testées. La méthode finale retenue a ensuite été évaluée en simulant le transport d'un polluant particulier : le méthane.

Enfin, ce rapport s'organise en deux grandes parties. Dans la première partie sont présentés le laboratoire ainsi que le contexte de la modélisation de la qualité de l'air. Dans la seconde partie sont présentés les travaux réalisés durant le stage. Ils s'articulent notamment autour des méthodes numériques développées et testées.

2 PRÉSENTATION DE L'ORGANISME ET DE LA MISSION

2.1 Le CEREAA

2.1.1 Historique et organisation

Dans un contexte où le développement durable est devenu un enjeu majeur au coeur des questions économiques, sociales et politiques, en 2003 EDF Recherche et Développement (EDF R&D) et l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (ENPC) décident de s'associer pour créer le Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREAA). Deux ans plus tard en 2005, le CEREAA accueille l'équipe-projet CLIME commune à l'ENPC et l'Institut National de Recherche en Informatique et Automatique (INRIA). Le fonctionnement du laboratoire est régi par une convention. En pratique, le CEREAA a deux tutelles (ENPC et EDF) qui définissent, au sein d'un Comité de direction biannuel, les orientations du laboratoire et fixent les moyens qui lui sont alloués. Le laboratoire est composé d'une cinquantaine de personnes réparties sur trois sites :

- à Champs sur Marne, site de l'ENPC ;
- à Chatou, site d'EDF R&D ;
- à Roquencourt, site de INRIA.



Logos du CEREAA et des organismes associés (ENPC, EDF R&D, Inria)

2.1.2 Thèmes de recherches

Les activités du CEREAA s'articulent autour de trois thématiques :

- **Dynamique des basses couches de l'atmosphère.** Le support technologique lié à cet axe est le logiciel de mécanique des fluides Code_Saturne dont la version atmosphérique a été développée au CEREAA.

- **Assimilation de données et d'images.** Les activités associées consistent en la recherche et le développement de nouvelles méthodes pour l'assimilation de données, la modélisation inverse et l'assimilation d'images dans les modèles de systèmes géophysiques. Il s'agit de la thématique associée à l'équipe-projet CLIME.

- **Modélisation de la pollution atmosphérique.** Le but étant de modéliser les processus physico-chimiques menant à des niveaux de pollutions potentiellement dangereux pour la santé humaine et les écosystèmes. Plusieurs modèles ont été développés au sein d'une plate-forme de modélisation Polyphemus qui sert par ailleurs d'outil de simulation pour les études que mènent les chercheurs du CEREAA.

C'est autour de ce dernier thème que mon sujet de stage s'inscrit.

2.1.3 Partenariats

Le CEREa a établi des partenariats avec des organismes scientifiques pour des activités spécifiques et techniques :

- avec l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire) pour le secteur nucléaire et l'étude des radionucléides.
- avec l'INERIS (Institut National de l'Environnement industriel et des RISques pour les impacts de pollutions chimique ou biologique.
- avec le Centre d'Etudes Techniques de l'Equipement de la région Nord-Picardie (CETE-NP) pour des études d'impact du trafic routier sur la qualité de l'air.

2.2 Description de la mission

2.2.1 Le contexte

L'utilisation généralisée de l'automobile et l'activité industrielle ont engendré et accru la pollution de l'air. Des modèles de qualité de l'air sont actuellement développés afin de suivre l'évolution des polluants dans l'atmosphère. Le CEREa développe la plate-forme de modélisation Polyphemus qui s'appuie sur le modèle de Chimie-Transport Eulérien Polair3D.

Ce logiciel permet notamment de simuler la dispersion de polluants réactifs soit à l'échelle continentale (Europe et Asie) soit à l'échelle régionale (Ile de France). L'échelle globale n'ayant pas encore été développée il n'est pour l'heure pas encore possible d'effectuer des simulations à l'échelle de toute la Terre.

Mon stage s'inscrit dans le projet du CEREa d'étendre les fonctionnalités de Polyphemus à l'échelle globale. J'exposerai ultérieurement les raisons qui motivent cette extension (section 5).

2.2.2 La mission

Mon stage visait à permettre à tout utilisateur de Polyphemus d'effectuer des simulations de dispersion de polluants fiables à l'échelle globale. Plusieurs étapes ont été nécessaires pour atteindre cet objectif. Ces dernières sont classifiées sous la forme de tâches qui ont rythmé le stage :

- Etude du modèle de chimie-transport et des divers processus ayant lieu dans l'atmosphère.
- Prise en main du logiciel Polyphemus via la réalisation de simulations à l'échelle locale (Europe, France).
- Etude bibliographique des méthodes numériques pour la modélisation globale dans l'atmosphère.
- Sélection de méthodes numériques appropriées en tenant compte de la complexité de mise en oeuvre et de la durée de réalisation de chacune.
- Programmation et phase de test des méthodes sélectionnées.
- Réalisation de simulations de dispersion de polluants à l'échelle globale à l'aide de la méthode retenue.

3 MODÉLISATION DE LA QUALITÉ DE L'AIR

La modélisation de la qualité de l'air a pour objectif d'estimer ou prévoir la concentration de polluants dans l'atmosphère. Par exemple, il peut s'agir de prévoir le dépassement des seuils de concentration au-delà desquels les polluants sont potentiellement dangereux pour la santé, ou de modéliser l'impact d'installations industrielles ou du trafic routier sur ces concentrations. Un Modèle de Chimie Transport (CTM) est un ensemble de relations mathématiques et algorithmiques permettant le calcul de l'évolution des polluants. Ce dernier doit prendre en compte plusieurs phénomènes qui sont nécessaires au suivi des concentrations.

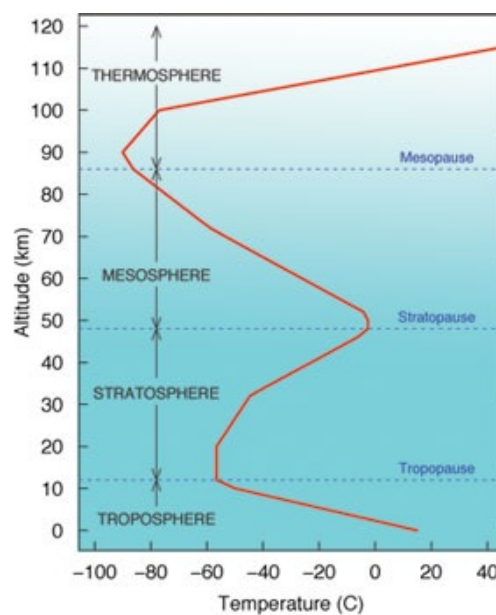
Nous abordons dans cette section la structure de l'atmosphère et les différents processus physico-chimiques qui s'y déroulent.

3.1 Structure et composition de l'atmosphère

3.1.1 Les couches atmosphériques

L'atmosphère est la fine couche gazeuse qui entoure notre planète. L'atmosphère est composée de différentes couches définies à partir du profil vertical de la température. La figure 3.1 illustre les quatre premières couches de l'atmosphère ;

- la troposphère : entre 0 et 8-18 km est caractérisée par une décroissance de la température avec l'altitude.
- la stratosphère située au-dessus de la troposphère s'étend jusqu'à 50 km et est caractérisée par une température croissante avec l'altitude, causée par la couche d'ozone qui absorbe les radiations ultraviolettes du Soleil
- la mésosphère est comprise entre la stratosphère et jusqu'à 80 km.
- la thermosphère s'étend jusqu'à 500 km.



Fig_2.1_ Couches atmosphériques

Source 1

En qualité de l'air, on s'intéresse surtout aux polluants dans les premiers mètres d'altitude ; ces derniers peuvent avoir un impact sur les populations ou les cultures agricoles. Les simulations sont donc restreintes à la troposphère : plus précisément jusqu'à environ 15 km dans cette dernière .

3.1.2 Composition de l'atmosphère

De nombreuses espèces chimiques sont présentes dans l'atmosphère. Certaines sont en quantité importante; d'autres à l'état de trace, en d'autres termes leur concentration varie entre les pico- et les mili- grammes par mètre cube d'air. Les espèces peuvent être en phase gazeuse, liquide ou solide. Sous forme solide et liquide, on parle d'aérosols ou de particules. On utilise précisément le terme d'aérosols pour désigner les particules en suspension dans l'atmosphère.

A chaque espèce présente dans l'atmosphère, on peut associer un temps de vie qui dépend à la fois de ses émissions, ses réactions chimiques et ses pertes. Par ailleurs, on distingue les espèces primaires émises par des sources dans l'atmosphère, des espèces secondaires qui sont uniquement le produit de réactions chimiques.

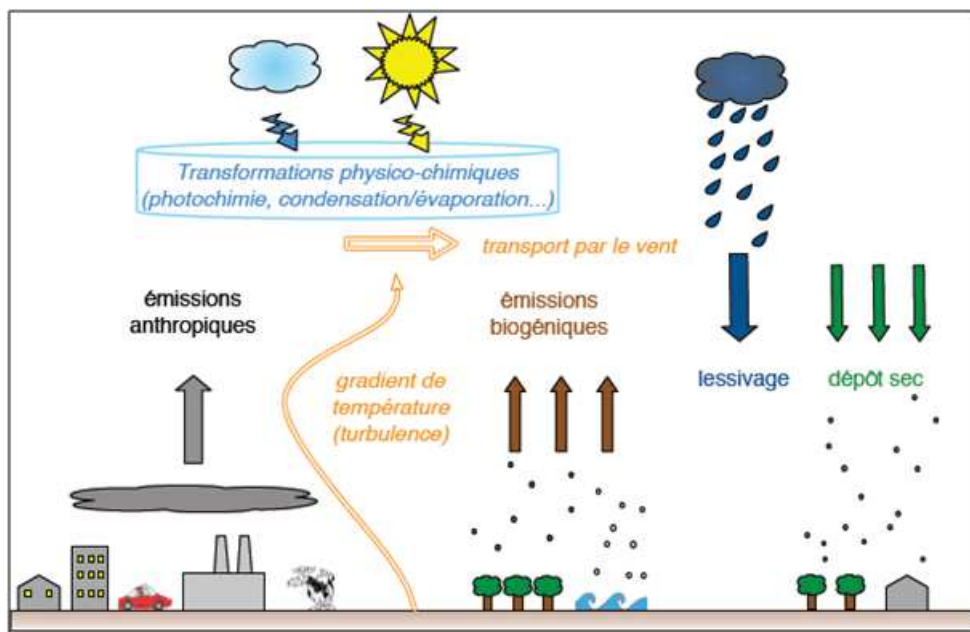
3.1.3 Les principaux polluants

Les pollutions atmosphériques dépendent des espèces considérées. On peut citer notamment :

- le soufre SO_2 , sous forme gazeuse, lié par exemple à la combustion du charbon ;
- les espèces liées à la photochimie : ozone O_3 , oxydes d'azote NO et NO_2 , et composés organiques volatiles (COV), présents sous forme gazeuse ;
- les métaux lourds (plomb, cadmium, zinc) liés à des processus industriels
- le mercure sous forme gazeuse ou dissoute ;
- les aérosols composés d'un mélange de sulfate (SO_4 particulaire), de nitrate (NO_3 particulaire), d'ammonium (NH_4 particulaire), de composés organiques secondaires, de sable, de sels de mer,...;
- les radio-éléments, d'origine naturelle comme le Radon Ra , lié à des essais nucléaires (radio-éléments militaires comme le Strontium, ^{90}Sr), à des accidents sur les centrales nucléaires (iode I et césium Cs) ou aux processus dans les centrales (krypton, Kr) ;
- les gaz à effet de serre comme les oxydes de carbone CO et CO_2 , le méthane CH_4 , le protoxyde d'azote N_2O , etc.

3.2 Les processus atmosphériques

De nombreux processus ont lieu dans l'atmosphère. Ils sont illustrés sur la Figure 3.2 ci-dessous. Nous allons décrire plus en détails ces processus.



Fig_3.2_ Processus physico-chimiques de l'atmosphère

Source 2

3.2.1 Emissions

On distingue les émissions anthropiques issues de l'activité humaine, des émissions naturelles.

Les émissions naturelles peuvent provenir de sources comme les volcans, les feux de forêts, les sels de mer, l'érosion du sable, ou peuvent être le produit de la photosynthèse comme les composés organiques volatiles.

Les émissions anthropiques sont liées notamment au transport routier et aérien, aux émissions industrielles, au chauffage ou à l'agriculture. Elles constituent une partie importante des émissions et sont localisées pour la plupart dans et autour des villes.

3.2.2 Les dépôts

On dit que les polluants se déposent au sol lorsqu'ils sont absorbés par l'eau, le sol ou la végétation. Ce phénomène constitue un terme de perte c'est à dire que les concentrations des polluants soumis à ces processus vont diminuer. Son intensité dépend des polluants, des conditions météorologiques, du rayonnement, du lieu (type et densité de végétation), de la saison (état de la végétation). On distingue deux types de dépôts : le dépôt sec et le dépôt humide.

Dépôt sec

On parle de dépôt sec au sol lorsque les polluants sont absorbés par l'eau, le sol ou la végétation. Ce phénomène constitue un terme de perte élevé. Son intensité du dépôt dépend des polluants, des conditions météorologiques, de l'éclairement, du lieu (type et densité de végétation) et de la saison (état de la végétation). Le dépôt est plus fort en journée et il est accru par l'éclairement. Au-dessus des masses d'eau, il croît avec la solubilité de l'espèce considérée.

Dépôt humide ou lessivage.

On qualifie de dépôt humide ou de lessivage la perte due aux transferts de masse avec la phase aqueuse (nuages ou pluies). Les polluants solubles peuvent pénétrer les gouttes de pluie lors de leur chute et sont ainsi précipités au sol.

Une autre forme de lessivage se déroule dans les nuages où les polluants solubles ont des échanges (transferts de masse) avec les gouttes d'eau.

3.2.3 Chimie de l'atmosphère

De nombreux polluants se transforment ou réagissent entre eux selon diverses réactions allant des réactions photochimiques à des réactions impliquant plusieurs molécules. En raison des nombreuses réactions et espèces chimiques impliquées dans la chimie atmosphérique, un mécanisme cinétique chimique complet et détaillé n'est pas envisagé pour des simulations de qualité de l'air. Par conséquent, on utilise souvent un ensemble de réactions simplifié pour les espèces chimiques considérées. Il existe deux types de réactions : les réactions photochimiques dites du premier ordre et les réactions du second ordre.

Les réactions photochimiques font intervenir une molécule et un photon. Elles s'accompagnent d'une absorption ou d'une émission de lumière fournie ou dépensée par des photons. La plus notable est la dissociation photolytique :



Les réactions du second ordre font interagir deux molécules A et B dans une réaction du type :



Ces réactions peuvent augmenter ou diminuer les concentrations des espèces en jeu si elles sont respectivement le produit ou le réactif de la réaction.

3.2.4 Le transport

Lorsqu'il s'agit du transport de polluants, on distingue généralement le transport dû à la convection et celui dû aux vents.

Le transport par le vent

Les principales composantes du vent sont essentiellement horizontales. Le vent est d'ailleurs, et de loin, la source essentielle du transport horizontal. Il s'annule au voisinage du sol sous l'effet de la rugosité et augmente avec l'altitude. Dans la couche limite atmosphérique, les vents horizontaux sont typiquement de l'ordre de quelques mètres par seconde. Les vents verticaux sont très faibles : ils sont de l'ordre du millimètre ou du centimètre par seconde. Ils sont négligeables par rapport à la turbulence.

Turbulence

La couche limite atmosphérique est un milieu extrêmement turbulent. Cela signifie que des mouvements à l'intérieur de l'air, qui peuvent être visualisés comme des tourbillons, dissipent l'énergie cinétique de l'écoulement. Ces tourbillons participent à la dispersion des polluants dans l'atmosphère, notamment sur la verticale. L'influence de la turbulence sur la dispersion des polluants est représentée en général dans les modèles par le mécanisme de diffusion turbulente. C'est ce mécanisme qui est responsable de la dilution des polluants et donc de la baisse des concentrations en aval des sources. Il faut préciser qu'il existe deux types d'origine pour la turbulence : mécanique et thermique. D'une part la turbulence naît de l'agitation de l'air due au frottement avec le sol (effet de cisaillement). D'autre part, son origine peut être le gradient vertical de température. Ce gradient dépend des capacités d'absorption du rayonnement solaire par la surface.

3.3 Les équations

3.3.1 Représentation de la turbulence

Le modèle de chimie-transport cherche à décrire dans un milieu donné (atmosphère, océan, fleuve) la dispersion d'un jeu d'espèces chimiques (ou biologiques), supposées réagir entre elles.

Ce jeu d'espèces constitue un système couplé (fluide-traceurs). Pour simplifier au mieux cette description, est établie l'hypothèse de dilution qui consiste à découpler d'une part, la dynamique du fluide, d'autre part, les concentrations des traceurs. Cette hypothèse de dilution revient à dire que l'on néglige dans l'équation d'évolution de l'énergie interne la contribution dues aux réactions chimiques, et figer à l'interaction matière/rayonnement. De plus, elle implique que les champs météorologiques (vent, température) soient utilisés comme des données connues. Ainsi, l'évolution des traceurs indicés par i obéit au système d'équation :

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\text{div}(Vc_i) + \chi_i(c) + S_i - P_i \quad (3)$$

En réalité, cette équation d'évolution, si elle est valide au niveau microscopique, n'est pas applicable telle quelle pour des écoulements turbulents. On utilise donc pour représenter la turbulence une méthode appelée la décomposition de Reynolds. On part de l'équation d'advection qui permet de modéliser le transport :

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = -\text{div}(V\tilde{c}) \quad (4)$$

où \tilde{c} est un champ tridimensionnel de concentrations et \tilde{V} est le champs de vent. La méthode de Reynolds consiste à décomposer toutes grandeurs physiques en une valeur moyenne et un terme de fluctuation turbulente. Par exemple pour le champs \tilde{c} , on a $\tilde{c} = c + c'$. On applique cette méthode à tous les termes de l'équation (4), puis on moyenne cette dernière, et on obtient alors :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(Vc) - \text{div}(\overline{V'c'}) \quad (5)$$

où $\overline{V'c'}$ est la moyenne de $V'c'$. la moyenne des termes $V'c$ et Vc' étant nulle.

V correspond au vent tridimensionnel et V' à la turbulence. Le nombre d'inconnues dans l'ensemble d'équations décrivant l'écoulement turbulent (qui n'est pas développé ici) est plus grand que le nombre d'équations. Ce qui implique que la description de la turbulence n'est pas fermée. Pour effectuer la fermeture de la turbulence on effectue une paramétrisation nommée la théorie-K :

$$\overline{V'c'} \simeq -K\nabla c \quad (6)$$

où K est une matrice de diffusion turbulente.

Cependant, la densité du fluide porteur ρ doit vérifier l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\rho V) \quad (7)$$

On souhaite naturellement que, si $c = \rho$, la concentration c suive la même évolution que la densité ρ du fluide porteur donc que c vérifie cette équation de continuité. Ce n'est pas le cas en prenant la paramétrisation précédente. Pour que c vérifie l'équation de continuité on introduit alors la paramétrisation :

$$\overline{V'c'} \simeq -\rho K \nabla \frac{c}{\rho} \quad (8)$$

Ainsi on obtient l'équation d'advection-diffusion :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(Vc) + \text{div}\left(\rho K \nabla \frac{c}{\rho}\right) \quad (9)$$

3.3.2 Equation de dispersion réactive

On retourne à l'équation (3). Soit c un vecteur de champs moyen de concentrations. A chaque concentration moyenne c_i de ce vecteur correspond une espèce chimique X_i . L'équation (3) est définie avec les grandeurs moyennes c et V , il est alors possible de remplacer le terme d'advection par le terme d'advection-diffusion calculé précédemment :

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\text{div}(Vc_i) + \text{div}\left(\rho K \nabla \frac{c_i}{\rho}\right) + \chi_i(c) + S_i - P_i \quad (10)$$

- les termes d'advection-diffusion ont été présentés précédemment. On précise que le vent et la matrice de diffusion dépendent du temps et de la position.

- χ_i est le bilan des productions et des pertes dues aux réactions chimiques de l'espèce X_i . C'est une fonction qui dépend des concentrations de toutes les espèces, de l'espace mais aussi des conditions météorologiques comme l'éclairement, l'humidité etc.

- S_i correspond au terme moyen de sources d'émissions de l'espèce, ce terme dépend du temps et de la position.

- P_i représente le terme moyen de dépôts. Ce terme dépend de la météorologie, du type de surface, ainsi que du temps et de la position.

Nous allons détailler dans le chapitre suivant comment cette équation est résolue numériquement dans la plateforme Polair3D.

3.3.3 Conditions limites

En règle générale, pour résoudre numériquement l'équation de dispersion réactive, il faut ajouter des informations supplémentaires : « conditions limites et initiales ». Les conditions limites et initiales sont tirées de données provenant de résultats de modèles globaux réalisées à une échelle plus grande. Il existe plusieurs conditions aux limites du domaine à définir : les conditions aux faces latérales (conditions aux limites classiques des équations hyperboliques : Neumann ou Dirichlet), les conditions au sol et les conditions au sommet.

Les conditions aux limites latérales correspondent à des flux de concentration de polluants apportés de l'extérieur du domaine. Dans le cas d'un modèle global, les conditions limites ne sont pas requises sur les faces latérales.

Au sol, des émissions ou des dépôts ont lieu, ils correspondent à la condition suivante :

$$-K \frac{\partial c_i}{\partial z} = E_i - v_{\text{dep}}^i c_i$$

E_i est le terme d'émission surfacique de l'espèce i , il dépend du type de scénario d'émission choisi (rural, urbain, régional) et comprend une part d'origine anthropique liée au trafic routier et une part d'origine naturelle.

v_{dep}^i représente la vitesse de dépôt sec et est paramétrisée en fonction des conditions météo en couche limite et du type de sol. Mathématiquement, cette relation correspond à une condition de Robin.

4 LE MODÈLE POLAIR3D

Dans la section précédente, nous avons décrit les processus mis en jeu pour suivre l'évolution de concentrations des polluants ainsi que l'équation d'évolution. Nous allons à présent nous attacher à donner une description du système de simulation Polyphemus qui s'appuie sur le Modèle de Chimie-Transport (CTM) Polair3D.

Nous décrirons dans un premier temps la structure de la plateforme Polyphemus, puis aborderons la résolution numérique de l'opérateur clé du stage : l'advection.

4.1 La structure de la plateforme de modélisation

Un Modèle de Chimie Transport (CTM) eulérien calcule des concentrations de polluants dans un domaine tridimensionnel maillé. Pour cela l'équation de dispersion-réaction (9) est discrétisée approchée par un schéma numérique que l'on résout. Polair3D est un CTM eulérien. Il fait partie de la plateforme de simulation Polyphemus. Une simulation effectuée par la plate-forme peut être décomposée en trois étapes :

4.1.1 Préprocessing.

Contrairement aux schémas numériques, les données d'entrées (celles qui interviennent directement ou indirectement dans l'équation à l'exception des concentrations) demeurent un point-clé. On peut distinguer les données fournies telles que les données météorologiques, et les données calculées par des paramétrisations. Le système de simulation doit pouvoir gérer les nombreuses données d'entrée et paramétrisations. Les données proviennent de diverses sources. Ils sont présentés dans des formats différents et sur des grilles qui leur sont propres. Elles représentent souvent plusieurs giga-octets. Enfin, elles interviennent à plusieurs niveaux, soit très en amont (occupation des sols, par exemple), soit très en aval (constantes de réaction chimique, utilisées au moment de l'intégration numérique). Un système performant doit donc être muni de bonnes capacités de gestion des données. Cette étape est réalisée en amont du modèle POLAIR3D en utilisant la librairie AtmoData - qui permet le traitement des données atmosphériques et le calcul d'entrées pour un code de chimie atmosphérique.

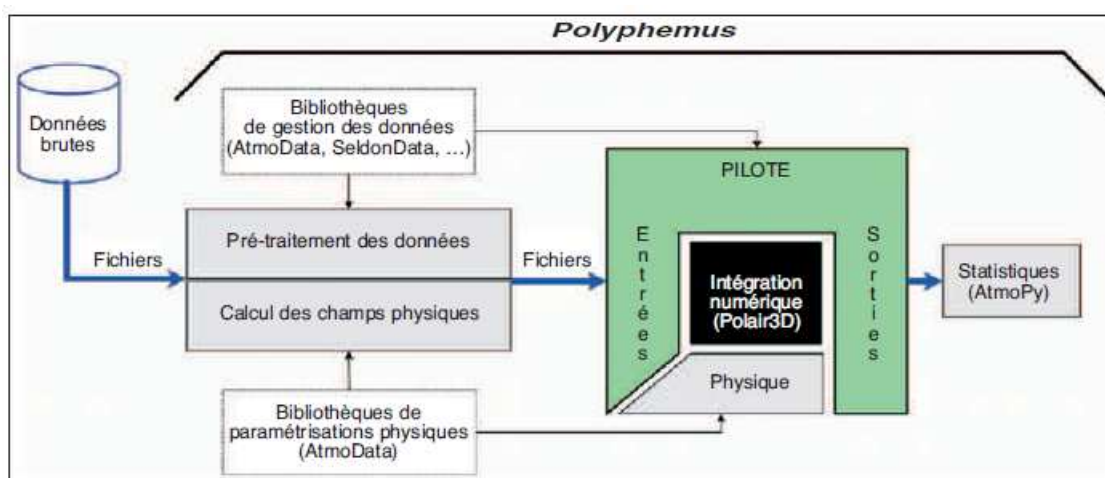
4.1.2 Processing

C'est l'étape où l'on effectue la résolution du système d'équations de conservation pour chaque polluant (POLAIR3D). Cette résolution se déroule par la prise en compte de l'intégration numérique. Pour intégrer l'équation couplée d'advection-diffusion-chimie, on sépare les opérateurs (en anglais, on parle de *splitting*). Pour chaque opérateurs : l'advection, la diffusion et la chimie, il existe un schéma numérique permettant d'intégrer le processus associé en temps. Cette méthode permet un gain de temps considérable. Le stage étant focalisé sur l'opérateur d'advection, nous développerons son schéma dans le chapitre suivant.

4.1.3 Postprocessing

Les deux éléments les plus courants dans le traitement des résultats sont l’affichage (graphique) et la comparaison aux observations. Plus encore que dans le calcul des concentrations, une grande flexibilité est requise car il ne s’agit pas d’effectuer des traitements systématiques. Pour répondre à ces objectifs, Polyphemus est doté d’une bibliothèque en Python appelée AtmoPy. Le choix du Python est motivé par le caractère objet et complet du langage, les modules (terme désignant les bibliothèques Python dédiés à l’affichage scientifique) et l’interactivité du Python.

Ces trois parties ont été bien séparées dans la conception de POLAIR3D et les échanges entre les trois modules se font par l’intermédiaire de fichiers binaires. Voici une figure représentant au mieux la hiérarchie des étapes et le fonctionnement de Polyphemus/POLAIR3D.



Fig_4.1_ Etapes clés de la plateforme Polyphemus

Source 3

4.1.4 Le module transport

Des modules codés pour chaque opérateur sont présents dans la plateforme, c’est le cas du transport. Le module transport inclut les opérateurs d’advection et de diffusion. La plateforme Polair3D ne permet pas d’effectuer des simulations réalistes à l’échelle globale, des modifications informatiques à plusieurs niveaux seront donc nécessaires pour permettre ces simulations. Ces modifications n’inclueront que l’opérateur d’advection.

Il faut préciser que les langages de programmation utilisés dans ce module transport sont le C++ et le Fortran. La structure de Polair3D est en C++, car il est nécessaire d’utiliser la programmation orientée objet. Cependant, l’intégration numérique, c’est à dire l’implémentation du schéma numérique, est effectuée en Fortran - ce langage est très adapté pour ce type de routine. En effet, les calculs lourds comportant de nombreuses boucles sont gérés efficacement et rapidement par Fortran. Des routines Fortran sont donc appelées par le coeur du programme codé en C++. De plus, l’affichage des résultats sera effectué grâce au Python. Ainsi, durant le stage, il sera nécessaire de manipuler les langages C++, Fortran et Python.

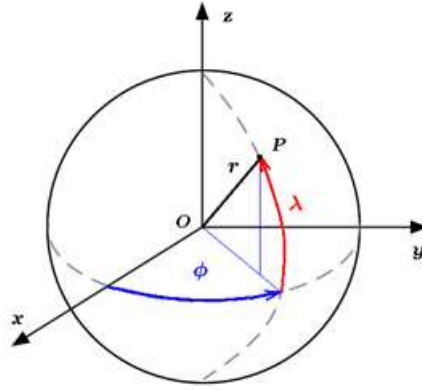
4.2 Intégration numérique de l'advection

4.2.1 Equation et coordonnées

On rappelle l'équation d'advection du traceur X de concentration c , dans un milieu de vitesse V en coordonnées cartésiennes :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(Vc),$$

Le système de coordonnées habituellement utilisé dans Polyphemus est le système de coordonnées cartésiennes. Mais pour les grandes échelles, la courbure de la Terre ne peut plus être négligée ; le système adéquat défini dans ce cas est géographique, c'est à dire, latitude-longitude. La Fig 4.2 ci-dessous illustre ce système de coordonnées.



Fig_4.2_ Système de coordonnées géographiques-

L'équation d'advection la plus adéquate est donc celle en coordonnées sphériques :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{1}{z \cos(\lambda)} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} (cu) + \frac{\partial}{\partial \lambda} (cv \cos(\lambda)) \right) - \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} (wc z^2)$$

où u, v, w sont les composantes de la vitesse du vent dans le système de coordonnées (ϕ, λ, z) , avec ϕ, λ désignant respectivement la longitude et la latitude.

u est un vent zonal (direction d'Est en Ouest, ou l'inverse), v un vent méridional (direction Nord au Sud, w un vent vertical mais très négligeable par rapport aux deux premières composantes.

Pour simplifier cette équation, est effectuée l'approximation $z = r$, ainsi que le changement de coordonnées suivant :

$$\begin{cases} x' = r \phi \\ y' = r \sin(\lambda) \\ z' = r - r_{\text{sol}} \end{cases}$$

Il faut préciser que ce système de coordonnées n'est pas cartésien, ce système n'a rien à voir avec un quelconque système de coordonnées connu.

Les vents dans ce nouveau système de coordonnées sont alors :

$$\begin{cases} U = u / \cos(\lambda) \\ V = v \cos(\lambda) \end{cases}$$

U et V sont les composantes isochores du vent.

L'équation devient alors :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x'}(cU) - \frac{\partial}{\partial y'}(cV) - \frac{\partial}{\partial z'}(cw) \quad (11)$$

L'équation (11) est l'équation générale qui gouverne le modèle POLAIR3D pour l'advection. Une modification des variables d'entrées : la vitesse du vent (u et v) permet donc de résoudre une équation comparable à celle que nous aurions dans un repère cartésien. Ces choix de changement de variables et coordonnées pour le vent permettent de retomber sur l'équation d'advection en trois dimensions qui correspond à un système cartésien. Cette hypothèse permet de simplifier la résolution. Cependant, le système de coordonnées n'en reste pas moins géographique, la latitude et la longitude interviennent implicitement dans cette équation. Le schéma numérique va résoudre une équation d'advection en coordonnées cartésiennes, mais les résultats seront associés aux coordonnées lat-lon.

4.2.2 Le schéma numérique

Cas 1D

Nous allons en premier lieu nous intéresser à cette équation en une dimension :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(cu)$$

nous envisagerons ensuite l'équation en trois dimensions. On se donne une discrétisation de l'axe des x selon la suite (x_i) avec un pas de maillage supposé constant Δx . On discrétise également le temps selon une suite (t_n) avec un pas de temps supposé également constant Δt .

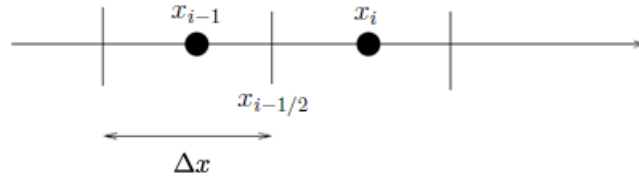


Fig.4.3- Discrétisation

Le schéma numérique d'advection est le schéma "Direct Space Time" *DST3* qui fait partie de la famille des schémas de type volumes finis avec limiteur de flux. Il s'agit d'un schéma permettant de concilier stabilité et précision. En effet, ce limiteur de flux consiste à pondérer un schéma d'ordre 3 avec un schéma décentré d'ordre 1 ayant une plus grande stabilité.

On écrit le schéma sous forme conservative :

$$c_i^{n+1} = c_i^n + F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n$$

où $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ est le flux numérique entre les mailles i et $i+1$.

On introduit le nombre de Courant qui intervient dans l'expression du flux :

$$\nu_{i+\frac{1}{2}} = \left| u_{i+\frac{1}{2}} \right| \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$u_{i+\frac{1}{2}}$ est le vent au point $x_{i+\frac{1}{2}}$ c'est à dire à l'interface entre les mailles T_i et T_{i+1} .

Les deux schémas se distinguent par leur flux .

Le flux du schéma décentré d'ordre 1 s'écrit :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \nu_{i+\frac{1}{2}} c_i & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ -\nu_{i+\frac{1}{2}} c_{i+1} & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \leq 0 \end{cases}$$

Le flux du schéma d'ordre 3 s'écrit :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \nu_{i+\frac{1}{2}} \left(c_i + d_0 \left(\nu_{i+\frac{1}{2}} \right) (c_{i+1} - c_i) + d_1 \left(\nu_{i+\frac{1}{2}} \right) (c_i - c_{i-1}) \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ -\nu_{i+\frac{1}{2}} \left(c_{i+1} + d_0 \left(\nu_{i+\frac{1}{2}} \right) (c_i - c_{i+1}) + d_1 \left(\nu_{i+\frac{1}{2}} \right) (c_{i+1} - c_{i+2}) \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \leq 0 \end{cases}$$

avec

$$d_0(\nu) = \frac{1}{6}(2 - \nu)(1 - \nu)$$

$$d_1 = \frac{1}{6}(1 - \nu^2)$$

Enfin le flux du schéma *DST3* est :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \begin{cases} \nu_{i+\frac{1}{2}} \left(c_i + \psi \left(\nu_{i+\frac{1}{2}}, \theta_i \right) (c_{i+1} - c_i) \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \\ -\nu_{i+\frac{1}{2}} \left(c_{i+1} + \psi \left(\nu_{i+\frac{1}{2}}, \frac{1}{\theta_{i+1}} \right) (c_i - c_{i+1}) \right) & \text{si } u_{i+\frac{1}{2}} \leq 0 \end{cases}$$

où

$$\psi(\nu, \theta) = \max \left(0, \min \left(1, d_0(\nu) + d_1(\nu)\theta, \frac{1 - \nu}{\nu}\theta \right) \right)$$

et

$$\theta_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{c_{i+1} - c_i}$$

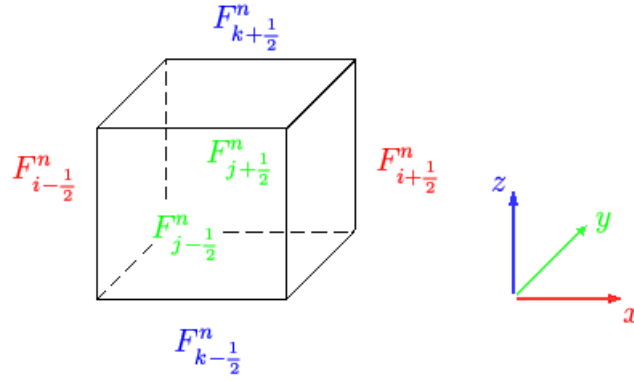
$\psi(\nu, \theta)$ joue le rôle du limiteur de flux

Extension au cas 3D

On retourne vers l'équation (11). Le traitement des trois dimensions peut être effectué en gardant le même schéma introduit précédemment, il suffit d'adapter ce dernier. On considère trois discrétisations en espace et une en temps : $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ et Δt . On effectue une résolution couplée des directions en agrégeant les termes liés à chacune d'elle. Ainsi, au lieu de calculer deux termes de flux pour une direction, on en calcule six qui correspondent aux trois dimensions ; enfin, on somme ces flux suivant l'expression :

$$c_i^{n+1} = c_i^n + F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n + F_{j+\frac{1}{2}}^n - F_{j-\frac{1}{2}}^n + F_{k+\frac{1}{2}}^n - F_{k-\frac{1}{2}}^n$$

Comme représenté sur la Fig. 4.2 suivante :



Fig_4.4_ Cellule

Il apparait un flux pour chaque face du parallélépipède. Les flux sont calculés de la même manière que précédemment sauf que pour chacune des faces est associé un vent. Ce flux se calcule donc selon la composante du vent perpendiculaire à la face en question. Dans le cas 1D, il y avait $u_{i+\frac{1}{2}}$ et $u_{i-\frac{1}{2}}$ et désormais, il y a $u_{i+\frac{1}{2}}$ et $u_{i-\frac{1}{2}}$ suivant x , $v_{i+\frac{1}{2}}$ et $v_{i-\frac{1}{2}}$ suivant y , $w_{i+\frac{1}{2}}$ et $w_{i-\frac{1}{2}}$ suivant z .

4.2.3 Les propriétés du schéma

L'efficacité d'un schéma est mesurée par sa propension à ne pas générer d'erreurs. Les erreurs peuvent provenir de :

- la discrétisation sur un pas de temps ; on parle alors de l'erreur locale, elle est liée à l'ordre du schéma.
- la propagation des erreurs antérieures ; on parle de stabilité du schéma.

L'ordre est lié aux approximations effectuées pour les termes dérivés. Le schéma précédant n'a pas d'ordre défini, il est plus précis qu'un schéma d'ordre 1, tout en étant moins précis que celui d'ordre 3.

La stabilité est assurée par le respect de la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) qui relie le pas de temps Δt , la discrétisation spatiale Δx et la vitesse du vent V par la relation suivante :

$$\left| \frac{\Delta t}{\Delta x} V \right| \leq 1$$

Dans le cas tridimensionnel et de notre schéma numérique, la CFL s'écrit :

$$\left| \frac{U \Delta t}{\Delta x} \right| + \left| \frac{V \Delta t}{\Delta y} \right| + \left| \frac{w \Delta t}{\Delta z} \right| \leq 1$$

Cette condition est plus restrictive que la précédente. Le pas de temps doit donc être plus petit pour assurer cette condition. Il faut rappeler de plus qu'il a été effectué le changement de variable :

$$\begin{aligned} x &= r \phi \\ y &= r \sin(\lambda) \end{aligned}$$

Les pas d'espace doivent être remplacés par leur expression :

$$\begin{aligned} \Delta x &= r \Delta \phi \\ \Delta y &= r \cos(\lambda) \Delta \lambda \end{aligned}$$

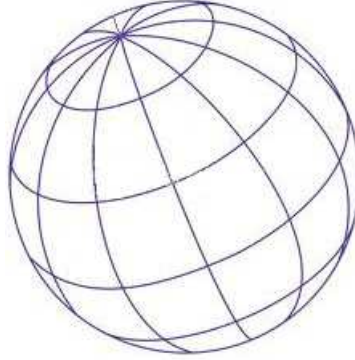
La condition CFL devient donc :

$$\left(\left| \frac{u}{\Delta \phi \cos(\lambda)} \right| + \left| \frac{v}{\Delta \lambda} \right| + \left| \frac{w}{\Delta z} \right| \right) \leq 1$$

Cette inégalité met en exergue l'influence de la latitude λ sur la stabilité.

4.2.4 Les contraintes de la modélisation globale

L'étude de la stabilité a mis en évidence un inconvénient du système de coordonnées et du choix du schéma. En effet, si les changements de variables effectués permettent de résoudre une équation d'advection similaire à celle en coordonnées cartésiennes; la singularité aux pôles nord et sud du globe terrestre liée aux coordonnées géographiques se répercute tout de même dans le schéma. En effet, dans ce système de coordonnées, les mailles rétrécissent à l'approche des pôles jusqu'à dégénérer en triangles aux sommets, comme l'illustre la Fig.4.5.



Fig_4.5_ Maillage en coordonnées Lat-lon

Source 4

La géométrie sous-jacente des coordonnées lat-lon se retrouve dans le schéma par la présence du $\cos(\lambda)$ dans $\Delta y = r \cos(\lambda) \Delta \lambda$. A l'approche des pôles, $\cos(\lambda)$ tend vers 0. Cela implique qu'il ne peut y avoir de flux traversant les pôles. De plus, cela impose un pas de temps qui devra être très petit pour permettre des simulations sans trop d'erreurs au voisinage des pôles. Il faut donc trouver des méthodes permettant de s'affranchir de ces contraintes.

5 LES MOTIVATIONS DU STAGE

La modélisation de la qualité de l'air ainsi que son outil de simulation (Polair3D ayant été décrits, nous allons désormais exposer les motivations de notre stage. La modélisation du transport de polluants à l'échelle du globe terrestre a deux motivations principales. La première motivation concerne l'étude de polluants se déplaçant sur de longues distances dans l'atmosphère. La seconde motivation correspond à l'obtention de données d'entrée plus fiables sur les concentrations d'ozone.

5.1 Modélisation globale de polluants

Dans l'atmosphère se côtoient des espèces chimiques dont les durées de vie sont différentes. Ces durées de vie peuvent varier de quelques jours à plusieurs années selon l'espèce considérée. Les espèces chimiques déposant et réagissant fortement ont un temps de vie relativement court contrairement à celles qui sont peu soumises aux réactions chimiques et aux pertes. Ce sont ces dernières espèces qui sont transportées sur de longues distances dans l'atmosphère et donc dont le suivi est nécessaire sur tout le globe terrestre. Les Polluants Organiques Persistants (POP), le mercure et le méthane font partie de ces polluants. Nous allons les introduire pour comprendre pourquoi ils font l'objet d'études.

5.1.1 Les Polluants Organiques Persistants (POP)

Ces polluants, dont la famille la plus connue est celle des dioxines/furannes, sont des molécules complexes. Contrairement aux autres polluants atmosphériques, ils ne sont pas définis à partir de leur nature chimique, mais à partir des quatre propriétés suivantes :

- la toxicité : ces molécules présentent un ou plusieurs effets néfastes prouvés sur la santé humaine.
- la persistance dans l'environnement : ces molécules sont résistantes aux dégradations biologiques naturelles. Elles se dégradent de 50 % sur une durée de 7 à 8 ans, leur demi-vie dans l'organisme humain est d'environ 7 ans.
- la bioaccumulation : ces molécules s'accumulent dans les tissus vivants, et leurs concentrations augmentent le long de la chaîne alimentaire.
- le transport longue distance : de par leurs propriétés de persistance et de bioaccumulation, ces molécules peuvent se déplacer sur de très longues distances et se déposer loin de leurs lieux d'émission (en Arctique notamment).

Les émissions de dioxines dans l'environnement proviennent de procédés industriels divers faisant intervenir la combustion incomplète de dérivés aromatiques chlorés, ou impliquant la synthèse de dérivés chlorés (incinération des déchets, fonderie, métallurgie, sidérurgie, brûlage des câbles, fabrication d'herbicides et de pesticides,...).

5.1.2 Le mercure

Il s'agit d'un métal d'aspect argenté et brillant, le seul métal se présentant sous forme liquide dans des conditions de pression et de température ambiante dans lesquelles il se vaporise toutefois assez aisément. La principale source d'émission dans l'environnement provient du dégazage de

l'écorce terrestre. Chez l'homme, la simple exposition à de fortes concentrations en mercure peut provoquer des désagréments tels que des céphalées, des convulsions, un électroencéphalogramme anormal, et des troubles respiratoires, pouvant conduire à la mort par asphyxie. Le mercure possède aussi des propriétés de transport lui permettant de migrer entre les différents milieux biotiques, que sont l'air, l'eau et le sol.

Les deux types de polluants présentés précédemment (les POP et le mercure) font actuellement l'objet d'une thèse au CEREIA [?]. En effet, compte tenu de leur présence dans les sols, la modélisation des échanges sol-atmosphère de ces polluants est nécessaire pour décrire toute leur chaîne de transformation, de l'émission dans l'atmosphère jusqu'à la contamination des écosystèmes et des cultures. La modélisation à l'échelle globale de ces polluants sous le logiciel Polair3D, permettra un meilleur suivi de ces derniers.

5.1.3 Le méthane

Le méthane (CH_4) est un gaz à effet de serre majeur, dont le potentiel en terme de réchauffement climatique est 23 fois supérieur à celui du dioxyde de carbone (CO_2). Le méthane est considéré comme un des principaux responsables du changement climatique. Le temps de vie du méthane troposphérique est de 10 à 12 ans. Le méthane peut être produit soit par pyrolyse de la matière végétale, lors des combustions, soit résulter d'émissions gazeuses dont l'essentiel est d'origine biologique. Nous étudierons plus en détail le méthane dans le cadre d'une simulation sur tout le globe, étant donné que ce gaz est transporté sur l'ensemble de la planète.

5.2 Incertitudes des conditions limites

5.2.1 Origine des incertitudes

Les données d'entrées comme les champs météorologiques ou les conditions aux limites sont fréquemment issues de modèles globaux. Ces modèles, qui ont parfois des résolutions spatiales très différentes de celles utilisées pour nos simulations, sont entachés de leurs propres incertitudes. Ces incertitudes proviennent des simplifications effectuées pour le traitement de la chimie. Par exemple, dans le cas d'un polluant où la chimie est assez complexe, les modèles globaux ne peuvent pas prendre en compte tous les paramètres associés à la chimie, des simplifications sont nécessaires. Ces simplifications permettent d'obtenir des temps de calculs raisonnables, mais cela se fait au détriment de la fiabilité des résultats. En effet, des études, dans le but de quantifier l'impact des incertitudes des champs d'entrée sur les simulations de polluants, ont été réalisées au CEREIA. Elles révèlent des incertitudes importantes au niveau des conditions limites utilisées pour l'ozone.

5.2.2 Conditions limites de l'ozone

L'ozone (O_3) est une espèce chimique dite cible en matière de pollution atmosphérique. Il est étudié aux échelles locales où sa présence en forte concentration dans les basses couches de la troposphère est nocive pour la santé humaine (provoque notamment des irritations des voies aériennes supérieures). Dans la thèse de Damien Garaud [3] soutenue en 2011 et intitulée « ... », une régression linéaire a été effectuée entre les champs d'entrée perturbés et les concentrations d'ozone simulées. Cette régression a été effectuée pour quantifier l'impact des incertitudes des champs d'entrée sur les simulations d'ozone. Il s'avère que les conditions aux limites pour l'ozone jouent un rôle important dans cette influence. Voici les résultats obtenus dans cette thèse.

Field Name	Averaged Coeff.	Uncertainty Range
O_3 boundary conditions	41.0	-20.5, +41.0
NO_2 photolysis	17.0	-4.9, +6.8
NOx emissions	10.7	-4.4, +7.5
Vertical diff. coeff.	5.0	-2.4, +4.5
ISO emissions	3.0	-1.5, +3.0
Attenuation	13.0	-3.0, +3.9
Temperature	150.0	-1.5, +1.5
API bounday conditions	5.0	-2.5, +5.0
NO_2 boundary conditions	1.8	-1.2, +3.6
Wind module	-6.0	-3.0, +2.0
Reaction no. 28	-32.0	-3.2, +2.9
Reaction no. 90	30.0	-2.7, +3.0
Reaction no. 182	-30.0	-3.0, +2.7

Fig_5.1_ Coefficients de regression et plages d'incertitude sur les données d'entrée en $\mu g/m^{-3}$

Source 5

Dans le tableau présenté Fig 5.1, les conditions limites de l'ozone sont celles affichant la plus grande plage d'incertitude. La plage d'incertitude correspond à l'écart entre la concentration de sortie et la concentration médiane. Cela signifie que les incertitudes liées aux conditions limites de l'ozone ont une forte influence sur les incertitudes des simulations. Ainsi il est important de posséder des données d'entrée fiables, et en particulier pour les conditions limites, si l'on souhaite réaliser des simulations les plus proches possible de la réalité. L'extension du modèle Polair3D à l'échelle du globe terrestre permettrait d'effectuer des simulations de l'ozone sur tout le globe avec une chimie plus adaptée aux études effectuées au CERE. Cela fournirait des données d'entrée dont la fiabilité serait sujette à caution.

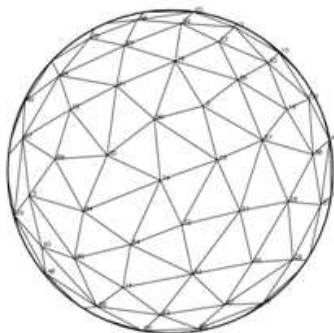
6 MÉTHODES EXPLORÉES ET TESTS

L'une des contraintes importante du modèle réside dans le choix du système de coordonnées et le maillage associé. Une des alternatives pourrait être de changer de système. Plusieurs organismes effectuant des modélisations à l'échelle globale ont dû faire face à ce type de contraintes. La littérature doit donc abonder en solutions. Cependant deux dernières exigences demeurent et concernent la programmation des méthodes. En effet, il s'agit d'une contrainte de temps et de moyens. Cette programmation doit être effectuée pendant la période du stage et doit s'accorder au modèle Polair3D. Nous aborderons, dans un premier temps, les méthodes qui ne respectaient pas ces conditions mais, qui par leur propriétés, méritent d'être mentionnées, puis nous exposerons celles qui sont retenues et qui ont été développées durant le stage.

6.1 Les méthodes éliminées

6.1.1 Les maillages non structurés

Un maillage non structuré en trois dimensions se caractérise par des mailles de formes non définies. Il peut s'agir d'un mélange de mailles tétraédriques, pyramidales, hexagonales etc.. En d'autres termes, les mailles ainsi générées arbitrairement sans aucune contrainte. L'avantage de cette méthode est que les mailles générées ont à peu près les mêmes dimensions. Cela constituerait une alternative aux singularités des pôles car il n'y aurait alors plus de rétrécissement des mailles. Cependant, de modifications seraient à effectuer dans Polair3D pour utiliser ce maillage : en effet, toute la gestion de donnée serait à changer. Cette méthode a dû être écartée pour ces raisons.

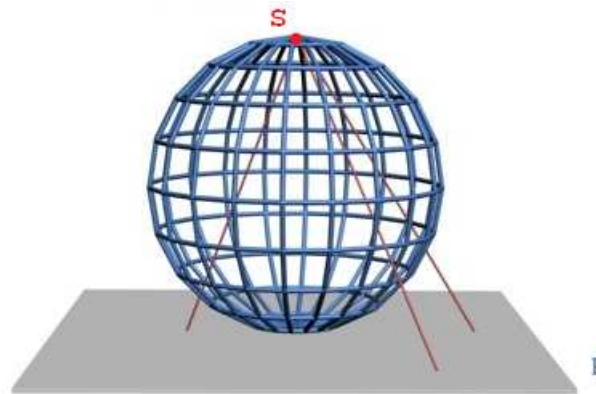


Fig_6.1.1_ Exemple de maillage non structuré

Source 6

6.1.2 Projection stéréographique

Le système de coordonnées étant à l'origine du problème, il paraissait judicieux de partir à la recherche d'un système de coordonnées moins contraignant. Néanmoins, pour une sphère, il n'en existe pas de nombreux. Seules les coordonnées stéréographiques polaires pourraient se présenter comme une alternative. On parle en réalité de projection stéréographique car elle dépend de la source et du plan sur lequel sont projetés les points de la sphère. En effet, la construction nécessite un point source S - en général l'un des pôles. Il convient ensuite de positionner un plan orthogonalement à l'axe liée à la source. On projette alors un point M courant de la sphère sur le plan en alignant les points S , M et M' (le point projeté). Sur la Fig référencée 6.1.1 ci-dessous, est effectuée une projection stéréographique de 3 points de l'hémisphère Sud.



Fig_6.1.2_ Projection stéréographique

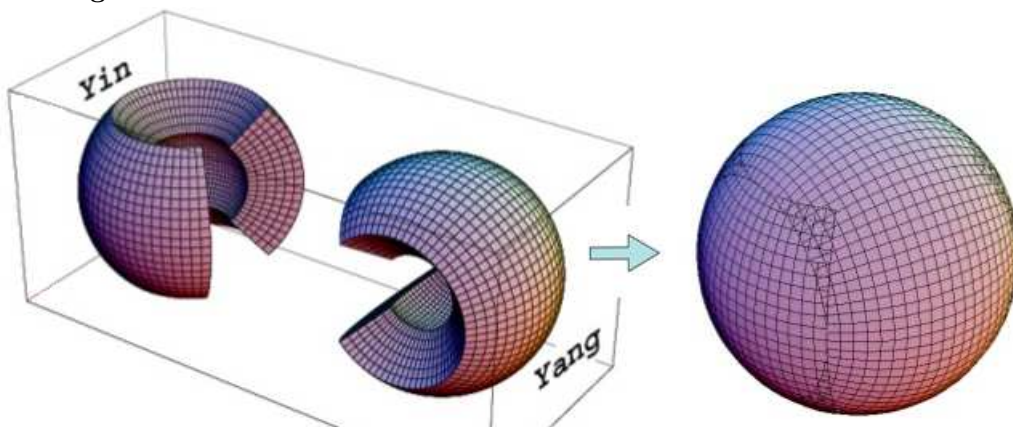
Source 7

Il suffit alors d'utiliser les coordonnées curvilignes du point sur la sphère pour obtenir les coordonnées du point projeté. La conversion des vecteurs et des positions est effectuée par la même méthode. Il est donc à priori possible d'ajuster les méthodes numériques de Polair3D à la projection stéréographique. Cependant, un premier inconvénient apparaît et concerne la forme de la surface projetée. En effet, pour utiliser les avantages de cette méthode, il serait intéressant de mailler directement la surface projetée or cette dernière est un cercle si la surface projetée est un hémisphère entier. Le code de Polair3D ne sait traiter que des maillages rectangulaires. Une solution consisterait à projeter une surface rectangulaire, mais d'autres inconvénients apparaissent alors qui poussent à abandonner cette possibilité. Malgré les contraintes liées à cette méthode, la singularité du maillage aux pôles est résolue, donc elle reste intéressante. Dans le cadre d'un projet visant à valider la méthode finalement choisie, il pourrait être intéressant de développer la projection stéréographique afin de comparer les résultats obtenus avec ceux de la méthode finale choisie.

6.1.3 Recouvrement de domaines

Les méthodes regroupées sous ce terme consistent à délimiter la sphère en plusieurs domaines de façon à recouvrir chacun de ces derniers d'un maillage ayant de bonnes propriétés géométriques. Une méthode de ce genre permettrait de se défaire de la singularité des pôles imposée par les coordonnées lat-lon. Certains recouvrements sont très singuliers :

Yin-Yang Grid

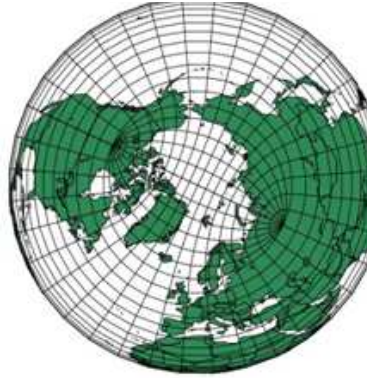


Fig_6.1.3_ Ying Yang Grid

Source 8

Ce maillage est proposé dans l'article [1], il est construit à l'aide de deux grilles qui recouvrent partiellement la sphère comme représenté sur la Fig.6.1.3. L'inconvénient de ce maillage est qu'il y a une zone de superposition des deux maillages ; ce qui nécessite un traitement spécial dans cette zone.

Tripôle grid



Fig_6.1.4_ Tripole grid

Source 9

Le maillage précédant est une solution développée dans la communauté océanographique. Plus particulièrement dans le GFDL Ocean Group [5]. La construction consiste à introduire sur la calotte polaire, repérée par les latitudes élevées, une grille spéciale se raccordant au maillage lat-lon. Si la singularité des pôles peut paraître éliminée, elle est en réalité juste déplacée au niveau de l'Alaska et de la Sibérie ; ce qui ne pose pas de problèmes dans le cas de modélisations dans les océans, en revanche dans le notre c'est le cas.

Ces méthodes, si elles ont le mérite pour certaines de résoudre les singularités aux pôles, elles requièrent toutefois un temps trop long de mise en oeuvre. Les solutions retenues vont tenter de rester au mieux fidèle à la structure du logiciel Polair3D et au système de coordonnées. La méthode la plus intuitive consistera à adapter le schéma numérique pour permettre la résolution globale. Nous tenterons à partir de cette étape de développer des alternatives permettant de réduire les contraintes.

6.2 Adaptation du schéma numérique

Les organismes travaillant sur la modélisation à l'échelle globale avec le système de coordonnées lat-lon sont nombreux. Dans la littérature scientifique, il est proposé un traitement spécial des flux pour palier à cette singularité des pôles. Nous abordons la méthode d'adaptation du schéma de Polair3D qui prend en compte ce traitement des flux.

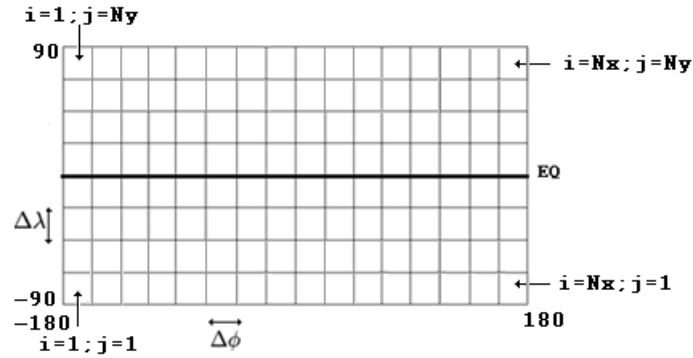
6.2.1 Le schéma

Revenons au schéma numérique et à son maillage associé. Nous nous focalisons surtout sur les deux principales dimensions, la direction des z étant triviale du point de vue numérique. Précisons que la sphère terrestre est maillée par une grille de $N_x \times N_y$ cellules. Les pas de maillages sont alors :

$$\Delta\phi = \frac{360}{N_x}$$

$$\Delta\lambda = \frac{180}{N_y}$$

On numérote les cellules de la manière suivante :



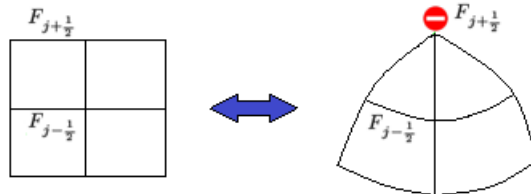
Fig_6.2.1_ Maillage

Les pôles nord et sud sont référencés respectivement par les cellules où $j = 1$ et $j = N_y$.

Il s'agit du maillage sur lequel est effectuée la résolution du schéma ; cependant subsiste le lien entre les coordonnées géographiques et le maillage précédant ; cette équivalence est illustré sur la Fig.6.2.2 .

Flux aux pôles

Pour traiter la singularité, il est suggéré dans l'article [6], d'annuler les flux sortants ou entrants dans les cellules des sommets des pôles. En effet, un flux à travers le sommet d'un triangle ne peut qu'être nul.



Fig_6.2.2_ Mailles aux pôles

En réalité dans Polair3D, ces flux sont déjà nuls. En effet, le vent méridional utilisé dans la plateforme - et qui s'écrit $V = v \cos(\lambda)$ - s'annule toujours aux pôles, ce qui implique un flux nul. On rappelle que le flux à une interface dépend du nombre de courant ν et que ce dernier est lié à la valeur du vent à l'interface (voir calcul des flux section 4.3.1). Il n'y a donc aucun changement à effectuer concernant la direction y .

Périodisation des cellules

Les cellules en $i = 1$ et $i = N_x$ sont en contact. En effet, les flux de direction x sortant des cellules en $i = N_x$ rentrent dans les cellules en $i = 1$. Il faut donc s'assurer de faire appel aux bonnes concentrations dans les calculs de flux. Il y a donc 4 cas particuliers à traiter :

$$i = 1 \Rightarrow c_{i-1} = c_{N_x} \text{ et } c_{i-2} = c_{N_x-1}$$

$$i = 2 \Rightarrow c_{i-2} = c_{N_x}$$

$$i = N_{x-1} \Rightarrow c_{i+2} = c_1$$

$$i = N_x \Rightarrow c_{i+1} = c_1 \text{ et } c_{i+2} = c_2$$

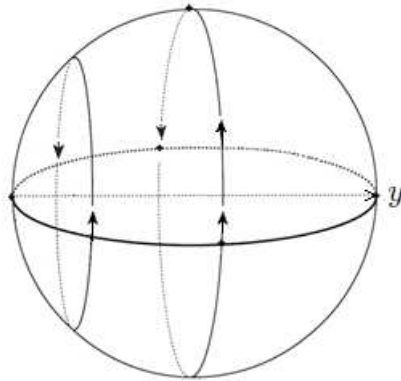
Les modifications se révèlent en fin de compte minimales.

6.2.2 Le cas test

Pour s'assurer de l'efficacité de ce schéma, il a été choisi deux cas particuliers permettant de suivre au mieux le transport d'une espèce au-delà des pôles : le cas d'une source continue et celui d'une source ponctuelle.

Le choix du vent

Pour mieux suivre les polluants se déplaçant au niveau des pôles, le choix du vent s'avère primordial. Il importe de choisir un vent permettant de suivre les polluants passant par les mailles qui rétrécissent et se dirigeant au-delà des pôles. Intuitivement, on pense que le choix d'un vent méridional et positif permettra de suivre ce transport, en réalité, il n'est pas du tout adapté car les polluants restent stationnés au pôle Nord. Nous optons finalement pour un vent rigidifiant. Il s'agit d'un vent effectuant une rotation autour de l'axe des y ; comme illustré sur la Fig.6.2.3 ci dessous.



Fig_6.2.3_ Vent rigidifiant

L'expression de ce vent est calculé en utilisant les conventions vent zonal u , vent méridional v et s'écrit :

$$\begin{aligned} u &= a \sin(\lambda) \sin(\phi) \\ v &= a \cos(\phi) \end{aligned}$$

En annexe, se trouve le calcul détaillé pour ce champs de vent. Pour notre simulation $a = 30 m.s^{-1}$

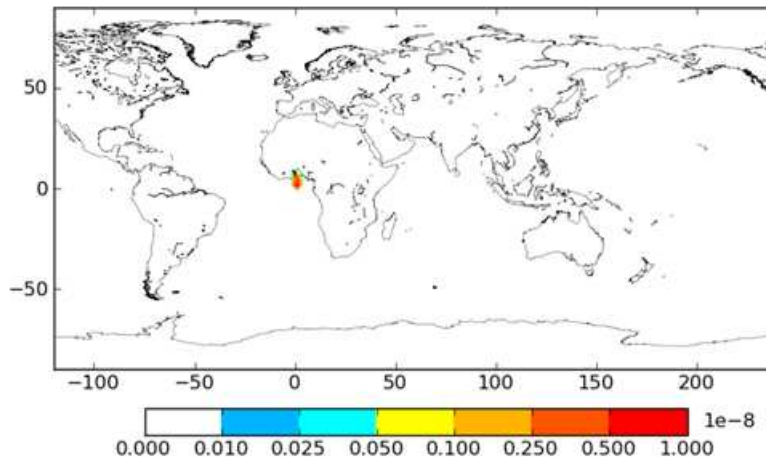
La grille de résolution se définit par $N_x = 120$, $N_y = 60$ et $N_z = 1$. La simulation effectuée dure 1000h avec un pas de temps de 10min. La source est émise en (0,0) en coordonnées lat-lon mais cela ne correspond pas au centre d'une maille ; ce qui implique que la source est légèrement décalée vers la droite par rapport au Méridien de Greenwich.

6.2.3 Résultats

Dans un premier temps nous avons lancé une simulation avec une source continue. Pour observer les résultats, deux systèmes de coordonnées sont possibles : géographiques et stéréographiques. Les résultats sont affichés grâce à l'outil Python. Cet outil permet d'afficher des résultats suivants plusieurs type de systèmes de coordonnées et différents axes de vues. Selon le système de coordonnées, les résultats affichés permettent de mieux visualiser le déplacement de l'espèce pendant la simulation.

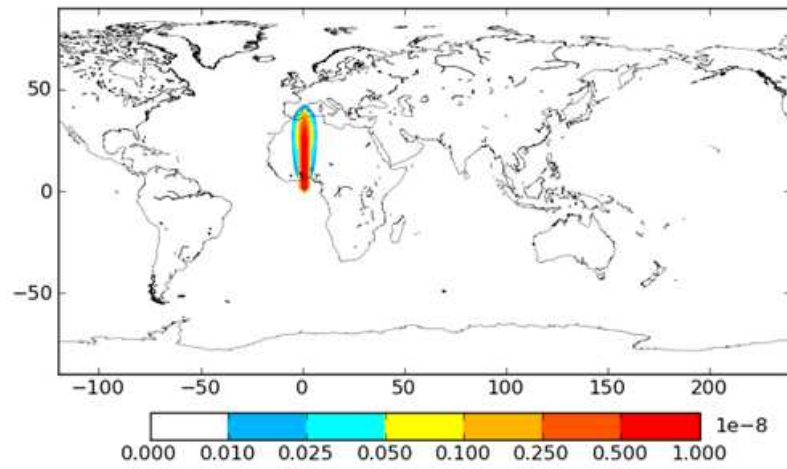
Source continue en coordonnées géographiques

Nous allons en premier lieu afficher les résultats de la simulation de la source continue en coordonnées lat-lon. La carte a été volontairement décalée afin de suivre la propagation au delà des pôles.



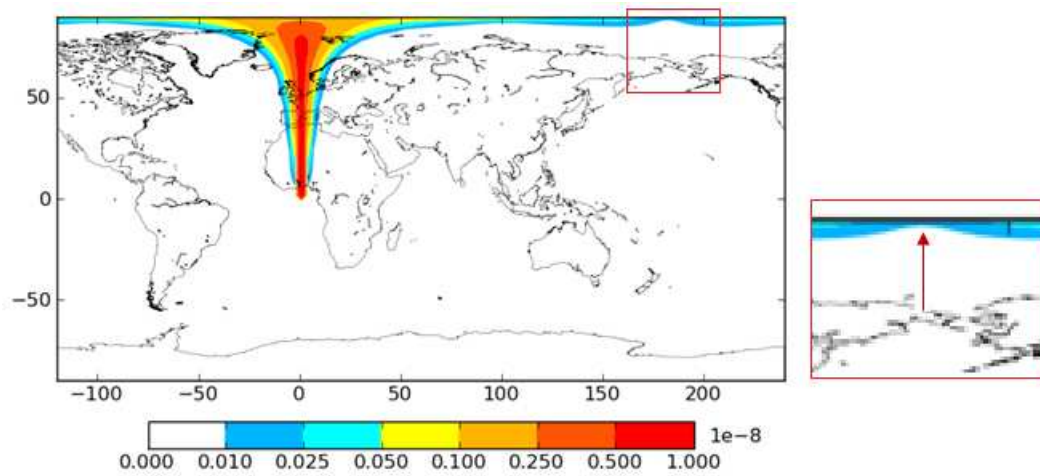
Fig_6.2.4_ T=2h

Il s'agit du point de départ de notre source.



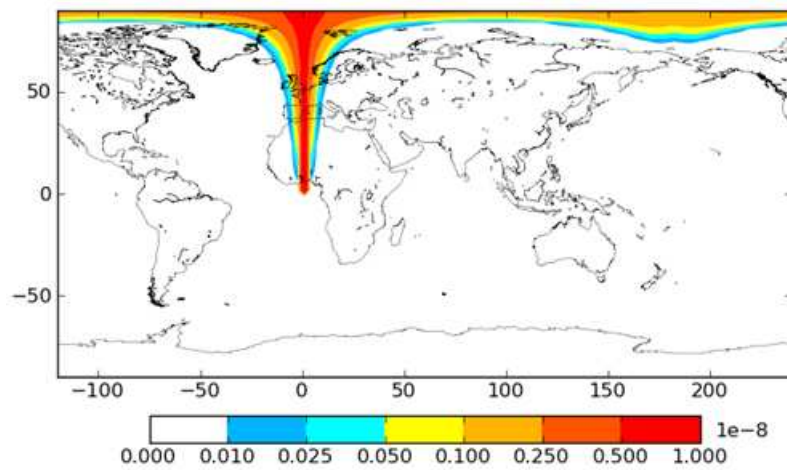
Fig_6.2.5_ T=35h

La source se propage effectivement vers le Pôle Nord.



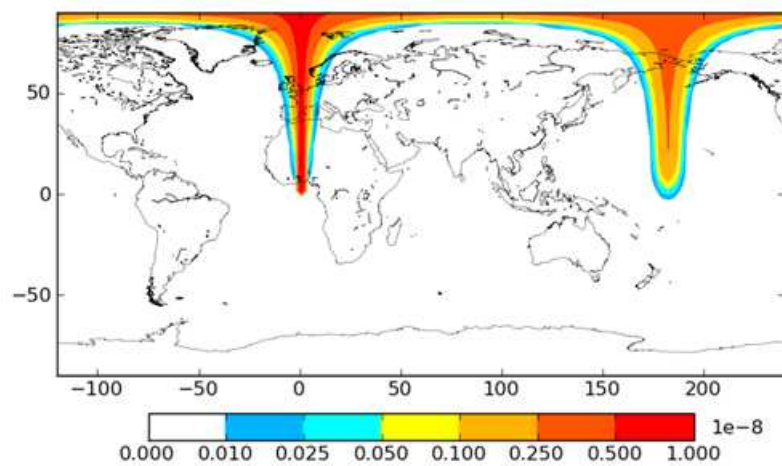
Fig_6.2.6_ T=83h

Cette figure met en exergue le passage par le Pôle Nord et dans quelles conditions il s'effectue. On remarque un creux en $\phi = 180$ comme indiqué sur la Fig.3 autour duquel le polluant s'est propagé.



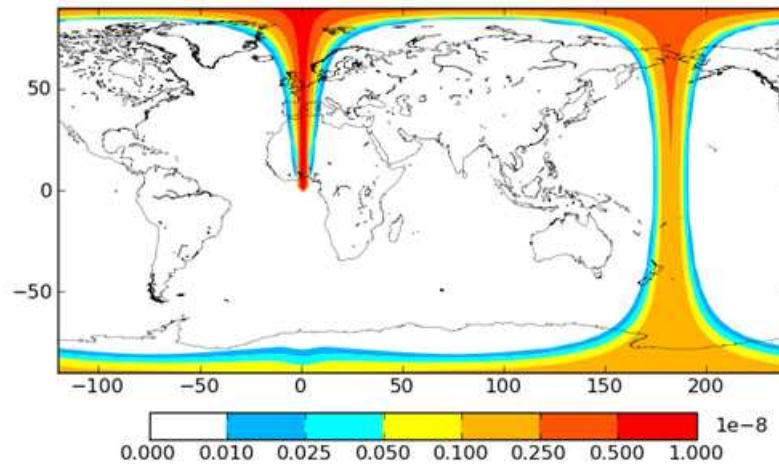
Fig_6.2.7_ T=101h

Quelques heures après, le creux se manifeste encore. Le polluant redescend selon le meridien de Greenwich.



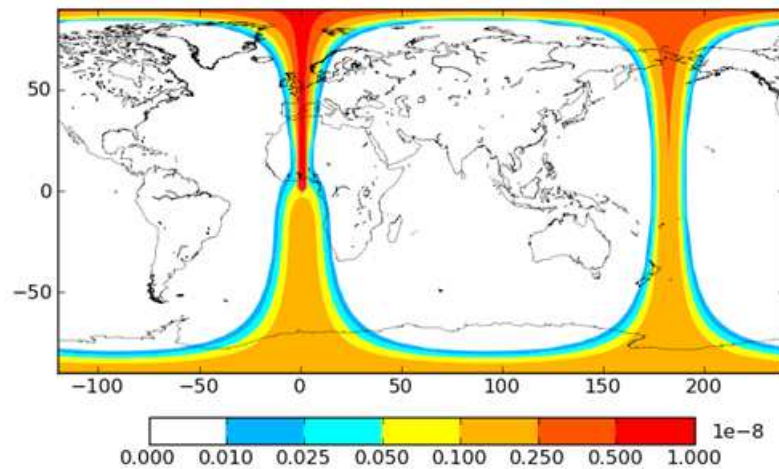
Fig_6.2.8_ T=178 h

On remarque que la source s'est déplacée au-delà des pôles sans trop de désagréments et le creux n'est plus apparant, cette fois.



Fig_6.2.9_ T=281 h

Sur cette figure aussi il semble que la source soit légèrement retenue au pôle sud également. On observe le même creux qu'auparavant mais cette fois en $\phi = 0$.



Fig_6.2.10_ T=371 h

Le polluant effectue un tour complet en 371h. Ce résultat est en accord avec la vitesse du vent choisi. En effet en $\phi = 0$, cette vitesse vaut exactement $30m.s^{-1}$. La distance parcourue par le polluant en un tour est 40 075 016 m : la circonférence de la Terre à l'équateur. La durée théorique nécessaire au polluant pour parcourir cette distance, est ainsi obtenue :

$$T = \frac{40\,075\,016}{30 \times 3600} = 371.06h$$

Le transport s'est donc déroulé sans retard significatif.

Source ponctuelle en projection stéréographique

La projection stéréographique permet de mieux observer ce qui se passe au niveau des pôles. Nous avons énoncé son principe dans la section 6.1.1. Cette fois cette méthode est utilisée pour afficher les résultats. Nous allons nous focaliser sur le transport au voisinage des pôles d'une source ponctuelle ce cas particulier permet de mieux suivre la traversée par les pôles.

Le pôle Nord :

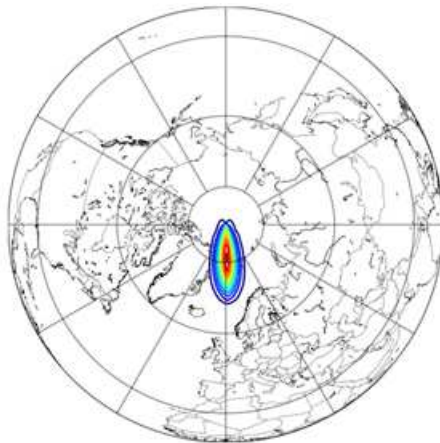


Fig_6.2.11_ T=35 h

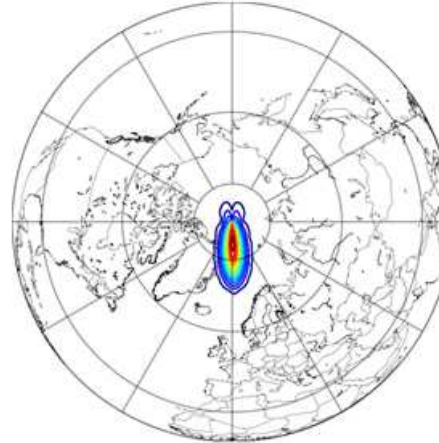


Fig_6.2.12_ T=56 h

On observe la source remonter le long du Méridien de Greenwich.

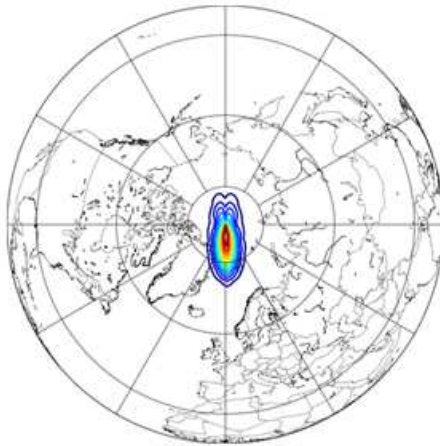


Fig_6.2.13_ T=83 h

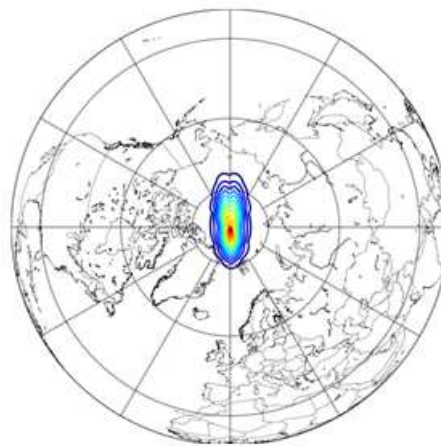


Fig_6.2.14_ T=86 h

On retrouve le creux observée lors du transport du source continue. Ce creux apparaît sur cette figure comme un coeur. En réalité, ce phénomène n'est pas étonnant, il est dû à la nullité du flux à travers les pôles. Il n'y a pas de transport, cela implique que la source est retenue : elle ne peut traverser le pôle. Sur les côtés cependant, le transport a lieu ; d'où la formation du coeur.

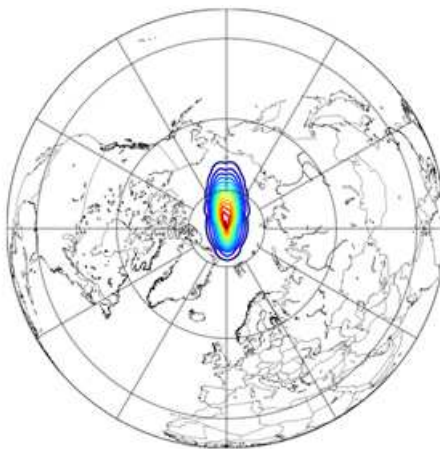


Fig_6.2.15_ T=89 h

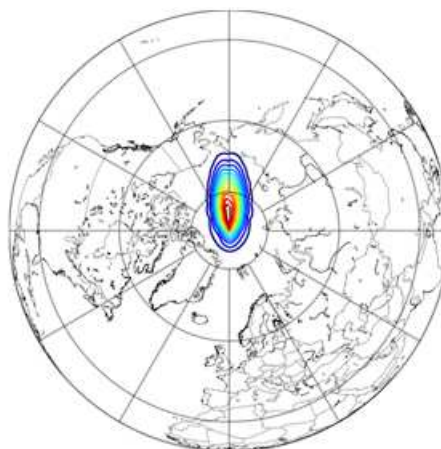


Fig_6.2.16_ T=95 h

L'observation précédente se confirme et est à rapprocher des figures 6.2.12 et 6.2.13 précédentes. On remarque que le point rouge s'attarde au pôle, tandis que sur les cotés les concentrations ont bien été déplacées.



Fig_6.2.17_ T=98 h



Fig_6.2.18_ T=101 h

Ces images illustrent la fin de la traversée : le point rouge s'est finalement détaché du pôle; le creux s'est estompé. Le bout de la source s'est déplacé sans difficultés.

Ce flux nul au pôle peut avoir des incidences sur la simulation. Nous avons réfléchi à un moyen de contourner cette restriction.

6.3 Méthode de la "calotte polaire"

6.3.1 Le principe

Nous avons trouvé dans la littérature scientifique une méthode permettant d'autoriser la traversée au delà des pôles. Il s'agit d'un concept exposé dans l'article [6]. Cette méthode est assez simple et facile à implémenter. En effet, elle consiste à moyenner les cellules au sommet des pôles Nord et Sud. Cela revient à ne former qu'une maille pour chaque pôle :

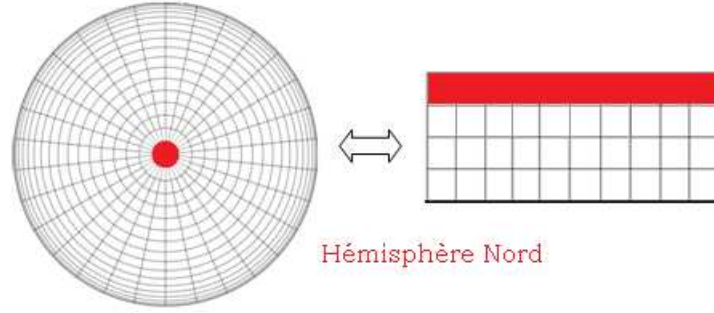


Fig.6.3.1- Maille unique au sommet du Pôle Nord

L'opération effectuée est la suivante :

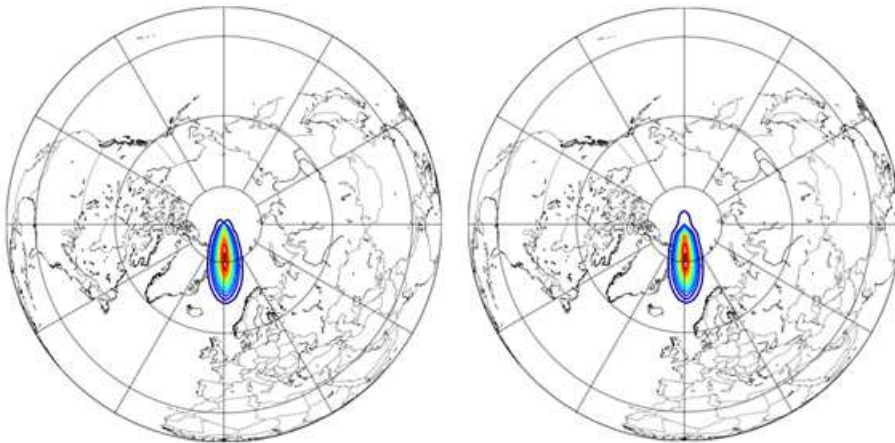
$$p_1 = \frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{i=N_x} c_{i,j} \text{ avec } j=1 \Rightarrow c_{i,j} = p_1 \text{ pour } i=1, N_x$$

$$p_{N_y} = \frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{i=N_x} c_{i,j} \text{ avec } j=N_y \Rightarrow c_{i,j} = p_{N_y} \text{ pour } i=1, N_x$$

Cette opération est effectuée à chaque pas de temps après le calcul des concentrations effectué par le schéma numérique. Cela revient à considérer qu'il n'existe qu'une maille unique aux pôles.

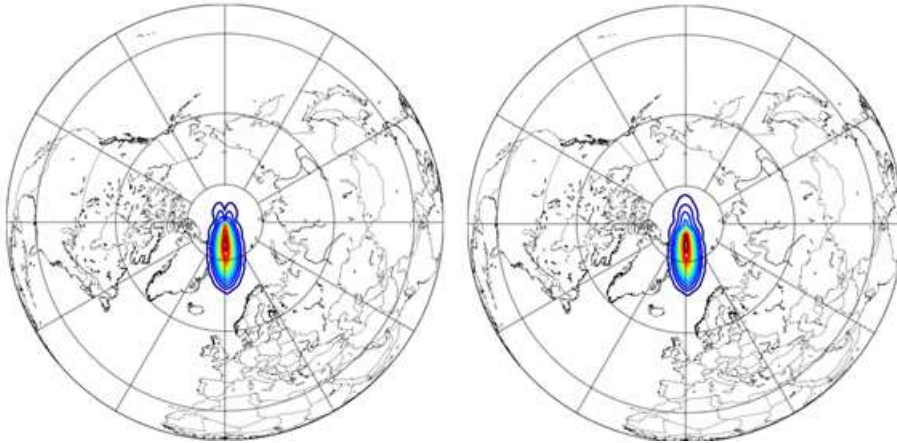
6.3.2 Comparaison des deux méthodes

Pour comparer les méthodes, on s'est focalisé sur le cas de la source ponctuelle. Les résultats comparés correspondent à la traversée par le pôle. On se restreint aux résultats illustrant le passage par le pôle Nord :



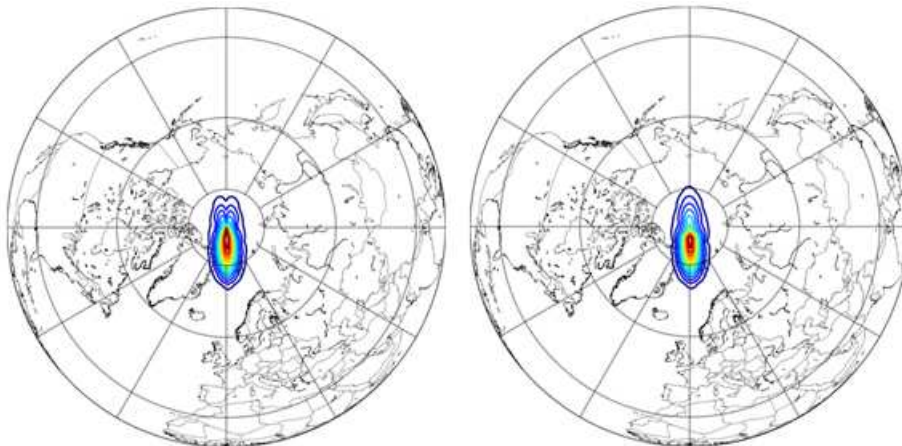
Fig_6.3.2_ T= 82 h

On remarque que la méthode de la calotte polaire permet de se débarrasser du creux . Le polluant se transporte plus facilement au-delà du pôle.



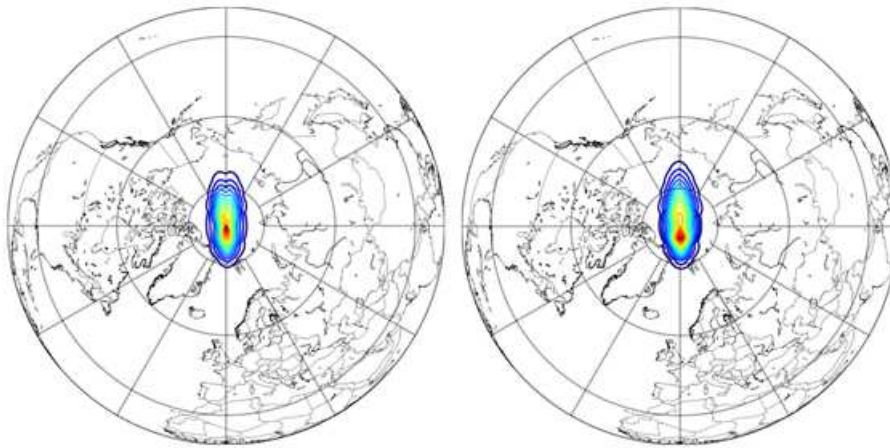
Fig_6.3.3_ T= 86 h

Le polluant continue son avancée, traverse bien le pôle, contrairement à la première figure sur laquelle le transport s'effectuait sur les côtés.



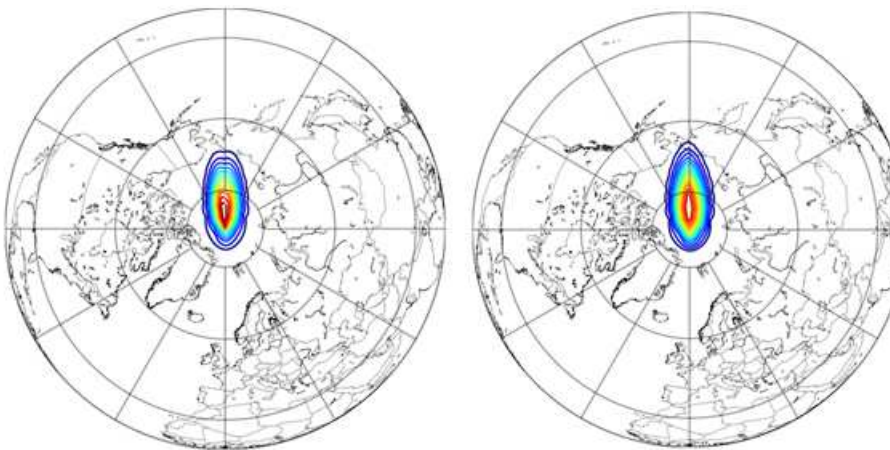
Fig_6.3.4 T= 89 h

Au lieu d'avoir un coeur, on observe cette fois, une calotte. La méthode porte donc bien son nom.



Fig_6.3.5_ T= 98 h

Tout le long de cette traversée, les résultats sont distincts. La concentration dans le cas de la méthode de la calotte polaire apparaît plus homogène. Cette remarque vaut aussi pour les figures ci-dessous



Fig_6.3.6_ T= 101 h

La méthode permet de faciliter le transport des polluant, au niveau des mailles du sommet des pôles. On précise que le pôle Sud n'est pas représenté, car les résultats sont sensiblement les mêmes. On remarque que la pointe du polluants est plus avancée dans le cas de la méthode de la calotte polaire sur la Fig.6.3. Dorénavant, cette solution complètera la méthode choisie.

6.4 Etude des vents maximum et CFL

Pour les deux méthodes précédentes aucun problème numérique n'est apparu. Néanmoins, en effectuant les mêmes simulations avec un vent plus élevé, on observe une divergence des concentrations qui, sur certaines mailles, valent l'infini. Cette instabilité numérique est à corrélérer au non respect de la condition CFL. En effet, plus le vent augmente, moins cette condition n'a de chance d'être respectée. Ainsi, si un utilisateur prend un champ de vent trop élevé, il ne sera pas en mesure de réaliser ses simulations. Il faut donc trouver une alternative pour palier à ce problème. Pour déterminer dans quelle mesure un utilisateur peut faire face à des instabilités numériques, il a été menée une étude des vents réels maximum au cours d'une année.

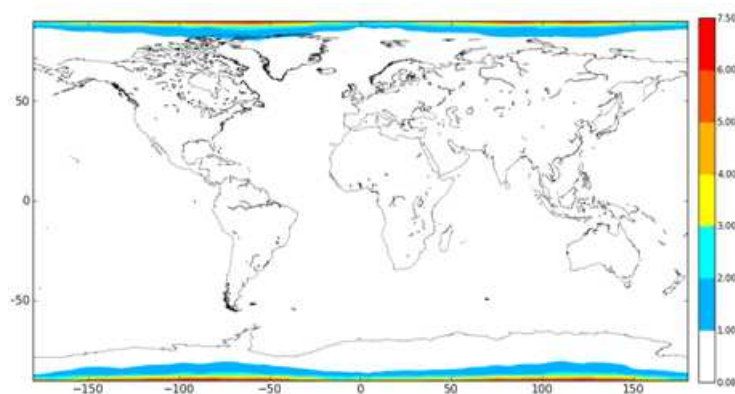
6.4.1 Etude des vents

Le respect de la CFL est liée aux valeurs des vents et au choix du pas de temps. Le pas de temps est un paramètre sur lequel on peut influencer, contrairement au vent en quelque sorte imposé. Etudier les vents permet d'envisager les contraintes qui seront imposées au modèle. Il sera alors possible de mettre en place une solution adaptée.

Cette étude s'est basée sur les données de l'organisme ECMWF qui fournit des prévisions de données météo. Les vents considérés correspondent à ceux de l'année 2008 toute entière avec un pas de temps de un jour. Ces données ont été adaptées à notre maillage (le même que précédemment), puis, pour chaque maille, a été calculé la valeur maximale des vents zonaux ainsi que ceux méridionaux de toute une année.

Les résultats mettent en exergue la valeur élevée des composantes zonales et méridionales du vent. Ils ont servis de point de départ au calcul du nombre de Courant maximum pour chaque maille.

A partir des résultats précédents, nous pouvons afficher les valeurs du nombre de Courant en prenant le même pas de temps précédent :



Fig_6.4.1_ Nombre de Courant

On observe que plus on s'approche des pôles, plus le nombre de courant atteint des valeurs élevées. Ces résultats mettent donc en lumière la forte probabilité d'avoir des instabilités numériques. Pour que la CFL soit respectée, il faut que ce nombre soit inférieur à 1. Cela signifie qu'il faudrait diviser le pas de temps par 7.5. Ce qui n'est pas le cas partout sur la carte précédente.

L'utilisateur risque d'être confronté à des problèmes numériques. Une solution consisterait à adapter le pas de temps aux vents d'entrée car c'est le paramètre sur lequel il y a possibilité d'action.

6.4.2 Adaptation du pas de temps pour respecter la CFL

Cette solution a été programmée au cours du stage. Nous avons réfléchi à la manière d'adapter le pas de temps afin qu'il respecte la CFL tout en étant compatible avec les autres modules de Polair3D. D'une part nous avons ajouté au module transport une partie où l'on calcule le nombre de Courant maximum correspondant à la simulation désirée. Il est alors envoyé un message d'erreur si la CFL n'est pas respectée. D'autre part, nous avons cherché un moyen de modifier le pas de temps sans affecter les autres modules (temps de calcul trop long).

Le nouveau pas de temps doit assurer le respect de la condition CFL et être un diviseur du pas de temps initial. Les concentrations en sortie du module advection ont été calculées tous les Δt_2 . Or dans les autres modules, ces concentrations sont calculées tous les Δt_1 . Il faut donc que $\Delta t_1 = N \Delta t_2$. A cette condition, la récupération sera possible.

Δt_2 est calculé de la manière suivante :

$$\Delta t_2 = \frac{\Delta t_1}{\text{Nb}_{\text{sous cycles}}} \text{ ou } \text{Nb}_{\text{sous cycles}} = \left\lceil \frac{\Delta t_1}{\Delta t_{\text{max}}} \right\rceil$$

On s'est assuré que l'utilisateur puisse lancer des simulations sans erreurs numériques. Cependant le temps de calcul risque d'être long. Il conviendrait d'expérimenter d'autres méthodes.

6.5 Construction d'un maillage réduit

Pour amoindrir les restrictions concernant le pas de temps, certains chercheurs se sont penchés sur le maillage. En effet, dans l'article [6], les auteurs ont développé un maillage et un schéma associé dont les propriétés permettent de se défaire de la singularité des pôles. Nous nous sommes donc inspirés de cette méthode.

6.5.1 Le maillage

Le maillage exposé dans l'article [4] est qualifié de « maillage réduit ». Il s'agit d'un maillage possédant moins de cellules horizontalement aux pôles qu'à l'équateur.

Pour construire ce maillage, on part d'une grille uniforme comme celle utilisée précédemment de $N_x \times N_y$ mailles. Il est alors proposé de réunir les cellules deux à deux horizontalement dès que le nombre de Courant en cette latitude est deux fois plus grand que la valeur à l'équateur. C'est ainsi que le pas d'espace $\Delta\phi$ est doublé (quadruplé, etc) en s'approchant des pôles. Pour fusionner convenablement les cellules de sorte que le maillage réduit soit compatible avec l'initial, il faut s'assurer que le nombre N_x soit divisible par 2^N s'il est nécessaire de doubler N fois $\Delta\phi$. En réalité les mailles seront regroupées deux à deux dans la mesure du possible. En introduisant p tel que N_x est divisible par 2^p , N doit être plus inférieur ou égal à p . Par exemple si $N_x = 120$, on ne peut doubler $\Delta\phi$ que 3 fois.

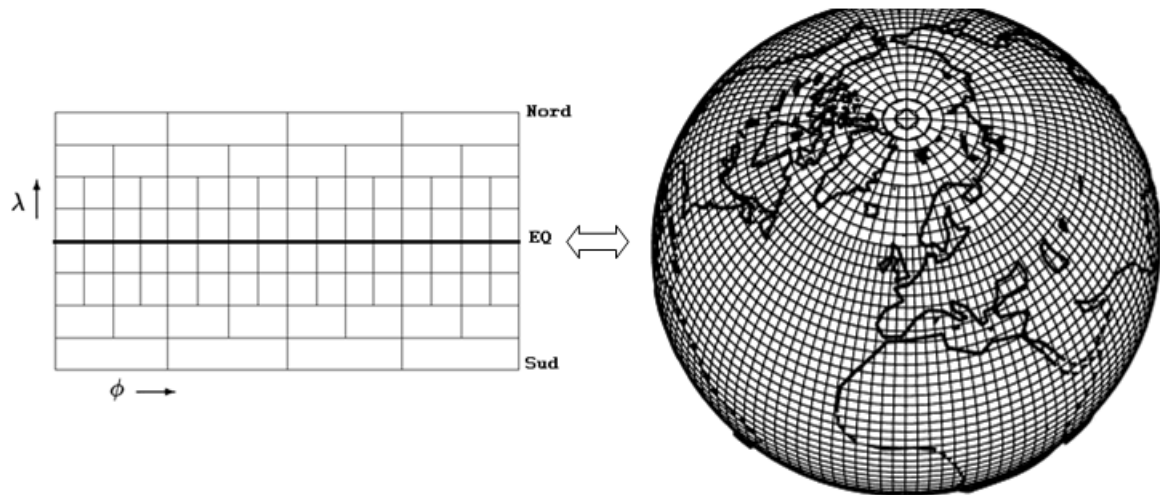
Le maillage est symétrique par rapport à l'équateur. Il existe donc trois zones distinctes : la région du pôle Nord, la région du pôle Sud, et la région équatoriale où le maillage est uniforme. Il est possible repérer la région équatoriale en introduisant l'indice J selon les y repérant le début du maillage uniforme dans l'hémisphère Sud.

Pour prendre en compte tous ces paramètres, un algorithme a été implémenté. Il est détaillé en annexe section 9.3. Cette modification du maillage a pour objectif d'amoindrir la condition CFL que l'on rappelle ci-dessous :

$$\left| \frac{u}{\Delta\phi \cos(\lambda)} \right| + \left| \frac{v}{\Delta\lambda} \right| + \left| \frac{w}{\Delta z} \right| \leq 1$$

C'est le terme « $\frac{u}{\Delta\phi \cos(\lambda)}$ » qui pose problème aux pôles car il tend vers l'infini lorsque l'on s'approche des pôles, d'où l'action sur $\Delta\phi$ qui va diminuer ce terme.

Le maillage obtenu est illustré à la page suivante :



Fig_6.5.1_ Maillage réduit

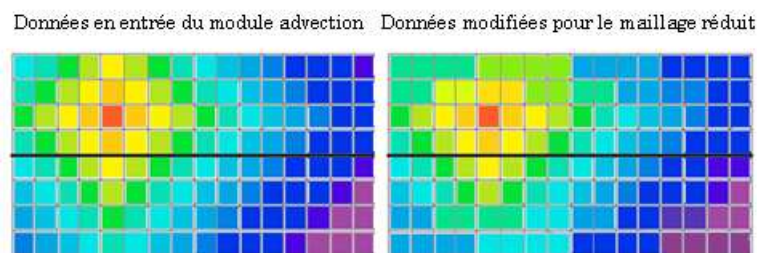
Source 10 (image de droite)

On remarque qu'en coordonnées sphériques, si les mailles ont grossi à l'approche des pôles c'est pour mieux ressembler à celles présentes au niveau de l'équateur.

6.5.2 Compatibilité entre les modules

La prise en compte de ce type de maillage dans tout le modèle Polair3D est très compliquée. Le modèle Polair3D fonctionne généralement aux mailles uniformes. Il faudrait donc modifier tous les modules de calcul (Diffusion, Chimie, Advection) pour prendre en compte ce maillage. Ici cela n'est pas nécessaire car seul le module d'advection nous intéresse. Cependant si l'on veut utiliser cette grille dans le module advection, il faut s'assurer que les données soient compatibles entre l'advection et les autres modules. En effet le modèle Polair3D doit pouvoir gérer le transport global et la chimie ou la diffusion en même temps.

A cette contrainte de compatibilité entre modules nous avons trouvé une solution. En effet, les données d'entrées que sont les vents zonaux, les vents méridionaux, et les concentrations, sont moyennées en entrée du module advection, de cette manière si deux mailles sont censées fusionner dans le maillage réduit, les données d'entrée sont moyennées sur ces deux mailles qui possèdent donc la même valeur. Ce traitement des données d'entrées est illustré par les figures suivantes :



Fig_6.5.2_ Concentrations moyennées en entrée du module d'advection

Les cellules censées fusionnées ont bien la même valeur. On peut donc appliquer le maillage réduit au module d'advection, tout en assurant sa compatibilité avec les autres modules. Il ne reste plus qu'à définir la résolution numérique sur ce maillage.

6.5.3 Un schéma adapté

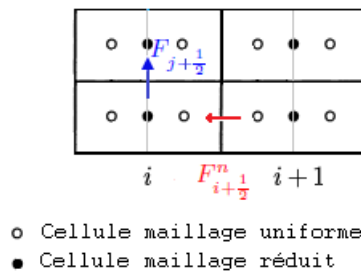
Le schéma utilisé précédemment sur le maillage uniforme était du type volumes finis. Désormais, le maillage utilisé n'est pas uniforme. Les caractéristiques de ce nouveau maillage sont les suivantes : un maillage uniforme au niveau de l'équateur, et un maillage non uniforme dans les zones situées au-dessus et en dessous de l'équateur. Intuitivement, on voudrait appliquer le même schéma qu'auparavant (cf section 4.2.2). Si dans le domaine équatorial cela reste possible, il n'en est pas de même en dehors. En effet en dehors du domaine équatorial des cellules ont fusionnées il en résulte qu'un traitement particulier doit être effectué pour assurer la conservation de masse et un transport satisfaisant d'une cellule à l'autre. La solution est de garder le même schéma numérique précédant (cf section 4.2.2) tout en adaptant les parties qui peuvent poser problème. Pour s'assurer d'un transport satisfaisant entre cellules les flux vont être modifiés. En effet on rappelle que la résolution numérique de l'opérateur d'advection est possible grâce au schéma numérique. A chaque pas de temps, le calcul des flux est effectué dans chaque direction. Ensuite ces flux sont ajoutés aux concentrations comme suit :

$$c_i^{n+1} = c_i^n + F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n + F_{j+\frac{1}{2}}^n - F_{j-\frac{1}{2}}^n + F_{k+\frac{1}{2}}^n - F_{k-\frac{1}{2}}^n$$

Le calcul précédant a toujours lieu d'être dans le maillage réduit mais le calcul des flux dans toutes les directions doit être modifié.

Les cellules fusionnées .

Il s'agit de l'élément le plus simple à modifier. En effet, les flux dans les trois directions sont toujours calculés comme dans la section 5.4.1 . Cependant, il convient d'adapter leur nombre aux cellules qui doivent fusionner. On rappelle que l'on a physiquement un maillage uniforme il y a donc N_x cellules horizontalement mais on doit en avoir N_{xj} dans le maillage réduit et donc uniquement un transport entre ces N_{xj} cellules. Pour assurer un transport satisfaisant entre les cellules, il sera alors calculés $3 \times N_{xj}$ flux. Comme dans la figure suivante, on illustre le flux suivant x :



Fig_6.5.3_ Flux des cellules fusionnées

Ici on calcule les flux de sorte que le maillage corresponde aux cellules en noir; les échanges n'ont lieu qu'entre ces cellules.

Les interfaces à une fusion de cellules

Pour les flux verticaux, un traitement particulier des interfaces entre cellules fusionnées et normales doit être réalisé. En effet pour les régions au dessus et en dessous de la zone équatoriale, lorsque les cellules fusionnent, par exemple en λ_J et λ_{N-J} , se pose un problème de conservation de masse entre les cellules en λ_J et celles en λ_{J+1} ou en λ_{N-J} et celles en λ_{N-J-1} . La maille en J reçoit deux flux, celui de la cellule en $(J, 2i)$ et celui de la cellule en $(J, 2i+1)$. Il est alors développé un système de conditions limites à l'interface d'une fusion de cellules. Le maillage étant symétrique, il se déroule le même phénomène en la maille $N-J$ qui reçoit aussi deux flux, celui de la cellule en $(N-J, 2i)$ et celui de la cellule en $(N-J, 2i+1)$.

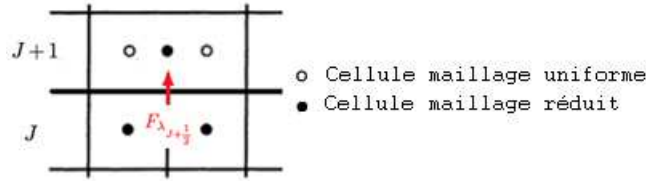
Pour les mailles ayant fusionné, on moyenne les flux partant de ces mailles pour aller vers des mailles 2 fois plus petites.

Au pôle Nord :

$$F_{i, J+\frac{1}{2}} = \left(F_{2i, J+\frac{1}{2}} + F_{2i+1, J+\frac{1}{2}} \right) / 2$$

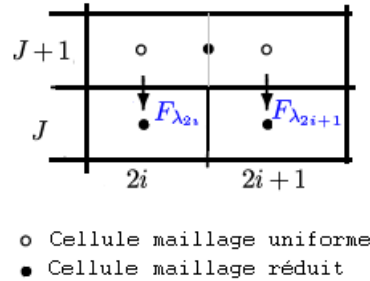
Au pôle Sud :

$$F_{i, Ny-J+\frac{1}{2}} = \left(F_{2i, Ny-J+\frac{1}{2}} + F_{2i+1, Ny-J+\frac{1}{2}} \right) / 2$$



Fig_6.5.4_ Flux sortant de deux mailles

Pour les mailles en face des cellules fusionnées (indiquées en J dans la figure) on calcule les flux grâce aux données stockées. En effet les concentrations du maillage uniforme sont toujours accessibles, il est donc possible de calculer les flux adéquats.



Fig_6.5.5_ Flux vers une maille double

La résolution sur un maillage fictif réduit est permise grâce à une manipulation habile des données et surtout une mise à jour, à chaque pas de temps, des concentrations.

A cette méthode, on ajoute la méthode de la calotte polaire.

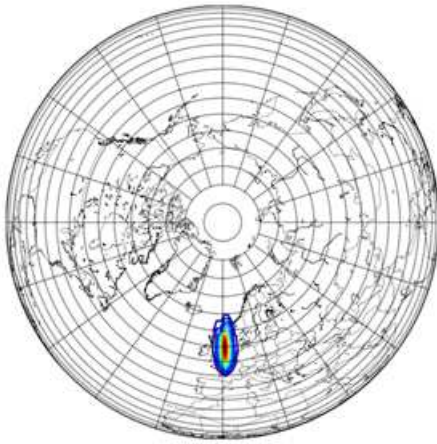
6.5.4 Le cas test

Partant des cas tests précédents section 6.2.2, pour mieux illustrer l'intérêt de ce maillage on change de grille. La nouvelle grille ainsi retenue présente les caractéristiques suivantes : $N_x = 160$, $N_y = 80$.

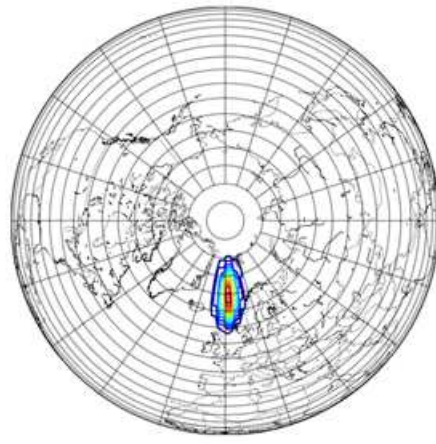
Dans le maillage réduit correspondant, les cellules fusionnent dans l'hémisphère Nord aux latitudes : 58.5, 74.25, 81, 85.5, 87.75 degrés. Dans l'hémisphère Sud, les latitudes correspondantes sont les suivantes : 31.5, 15.25, 9, 4.5, 2.25 degrés.

On s'est intéressé au cas de la source ponctuelle en coordonnées stéréographiques. Voici les résultats obtenus, sachant que le polluant est principalement observé dans les régions autour des pôles.

Le Pôle Nord

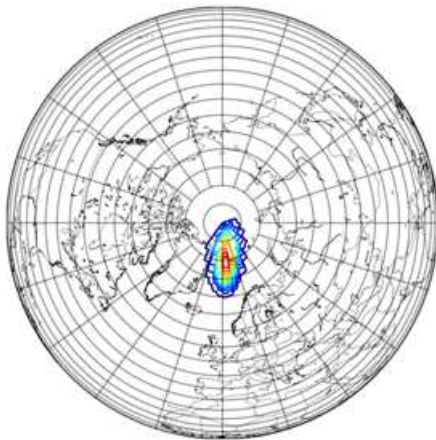


Fig_6.6.6_ T=56h

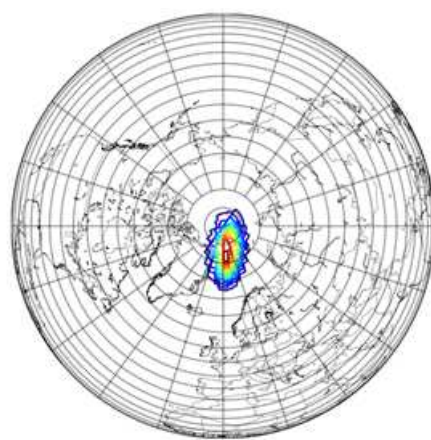


Fig_6.6.7_ T=71h

Précédemment la source ponctuelle présentait une forme plus arrondie, désormais la forme est plutôt polygonale, cela vient du fait que les mailles sont plus grosses à l'approche des pôles.

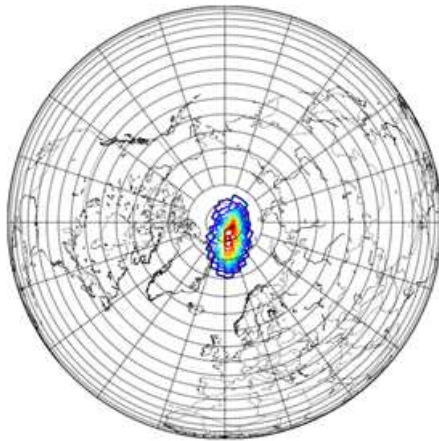


Fig_6.5.8_ T=83h

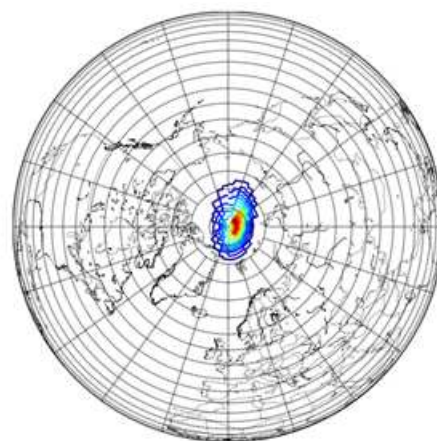


Fig_6.5.9_ T=86h

Ici, l'impression est que le polluant a du mal à se déplacer du côté gauche du méridien de Greenwich. La zone centrale du polluant, de couleur rouge foncée, est du côté droit du méridien. Comme nous l'avons expliqué précédemment (cf section) cela provient du fait que le méridien n'est pas au milieu d'une maille mais que la source est présente initialement dans la maille juste à droite du méridien. De plus le transport a du mal à s'effectuer horizontalement de part et d'autre du méridien, car la composante zonale du vent dans cette maille est nulle (voir formule du vent rigidifiant en annexe section 9.2). Deuxièmement, les mailles sont plus grosses. Conséquences : les concentrations sont diluées sur les mailles gauches. Cela permet d'expliquer que le transport semble facilité à droite et non à gauche du méridien. C'est donc bien la géométrie du maillage qui est à l'origine de ce phénomène et non un problème de flux.

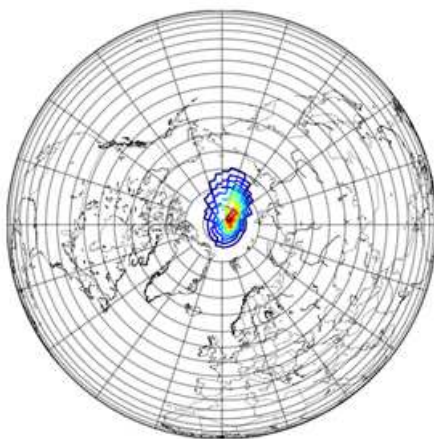


Fig_6.5.10_ T=89h

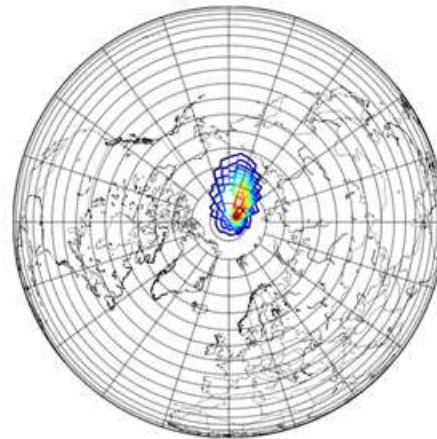


Fig_6.5.11_ T=95h

Le transport à droite du méridien est toujours plus important que celui à gauche. Il semble de plus que le point rouge contourne le pôle. Ici encore :



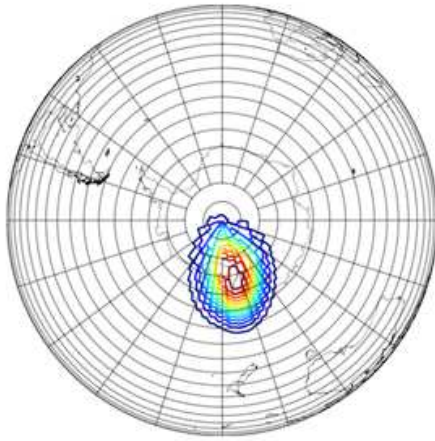
Fig_6.5.12_ T= 98h



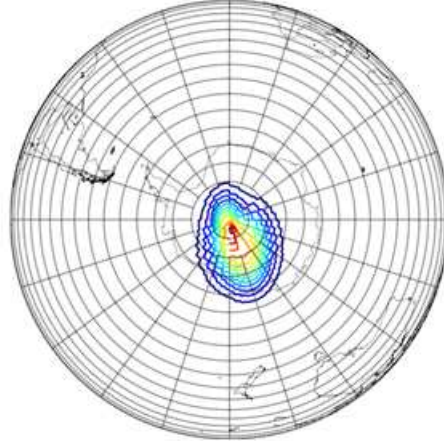
Fig_6.5.13_ T= 101h

Le pôle Sud

Pour mettre en évidence le comportement de la source selon la géométrie du maillage, on montre le passage de la source via le pôle Sud. Voici les figures obtenues :

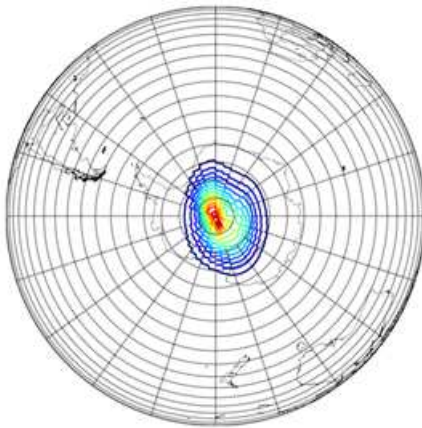


Fig_6.5.14_ T= 263

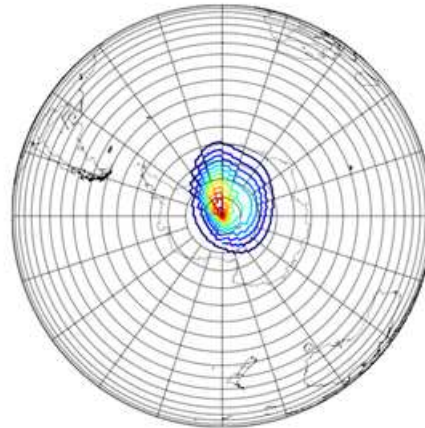


Fig_6.15_ T=272

Au pôle Sud, la différence entre le transport à droite et à gauche du méridien est moins présente.

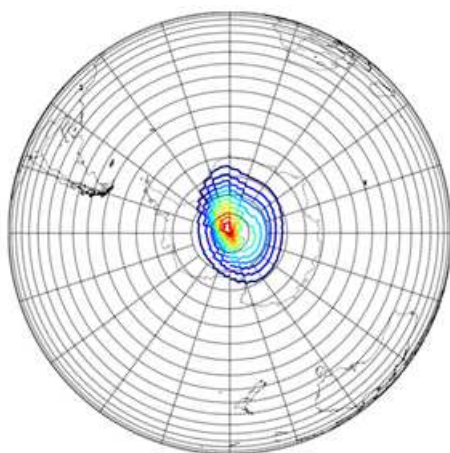


Fig_6.5.16_ T=295

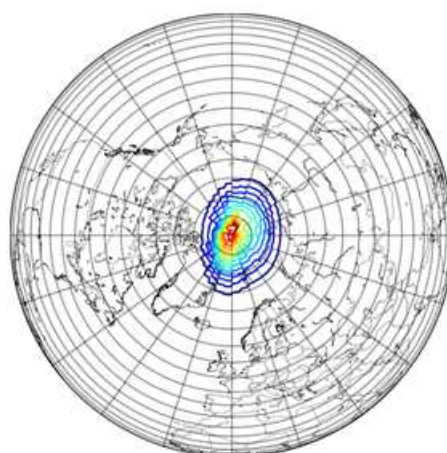


Fig_6.5.17_ T=298

Ces figures mettent en évidence un transport satisfaisant du centre de la source - en rouge - qui passe bien par le centre du pôle. Ces figures mettent en évidence une différence entre les pôles Nord et Sud concernant le transport à travers le sommet. Durant le stage nous avons vérifié maintes et maintes fois que les flux étaient calculés de la même façon dans les deux hémisphères. Finalement pour confirmer qu'il s'agit bien de la géométrie du maillage responsable cette différence, nous avons modifié le sens du vent rigidifiant. Au lieu d'avoir le sens Sud vers Nord au méridien de Greenwich, le polluant se déplace du Nord vers le Sud au niveau du méridien. En effectuant une simulation dans ce nouveau cas de figure, on observe que les pôles ont échangé de rôle. Les Fig. 6.5.18 et 6.5.19 illustrent cette analyse :



Fig_6.5.18_Pôle Sud

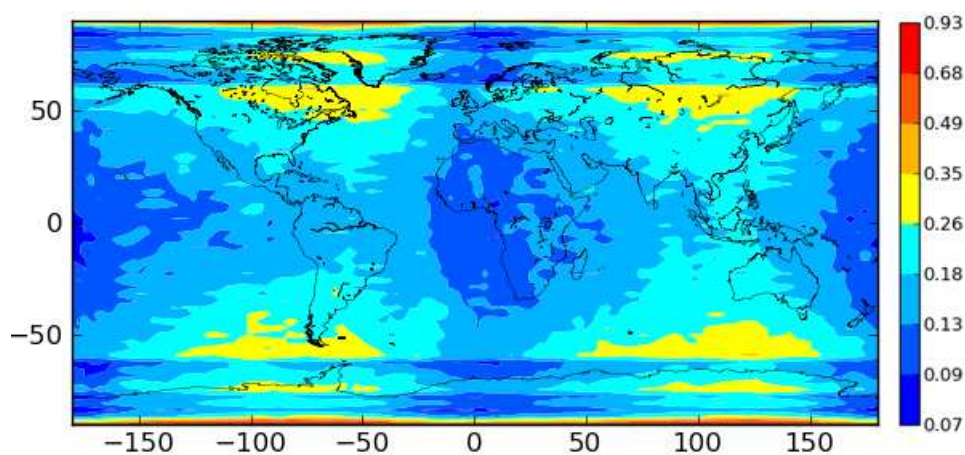


Fig_6.5.19_Pôle Nord

On a exactement le même comportement de la source aux pôles pour des sens de vent opposés. Le calcul des flux n'est donc pas à l'origine de cette différence.

6.5.5 Etude de la CFL

Si à priori la méthode dite « du maillage réduit » ne semble pas plus intéressante que les précédentes (transport au delà des pôles moins efficace), en réalité elle réduit considérablement le nombre Courant. Alors que la méthode d'adaptation du schéma de Polair3D montre ses limites pour des vents forts, la méthode du maillage réduit permet en revanche des simulations en respectant la condition CFL. Nous nous en sommes assuré en calculant le nombre de Courant qui correspond à notre maillage réduit. Voici la figure obtenue qui illustre ces affirmations :



Fig_6.5.18_ Nombre de Courant

La figure 6.5.18 met en exergue le respect de la condition CFL dans les cas extrêmes où les vents sont forts. On rappelle que le calcul du nombre de courant avait été effectué sur les vents maximums d'une année. Cette méthode a donc montré son efficacité quand au respect de la CFL dans des conditions de vents extrêmes.

6.6 Simulation de la dispersion du méthane sur le globe terrestre

Maintenant que le modèle global a été validé sur différentes configurations, nous allons éprouver le modèle lors d'une simulation avec un polluant donné : le méthane. La simulation sur un cas particulier va permettre de mettre en évidence, s'ils existent, les limites du modèle. Dans la section 5 (les motivations), nous avons introduit brièvement le méthane. Cependant pour être en mesure d'approcher au mieux l'évolution du méthane dans l'atmosphère, de nombreuses informations concernant ce polluant sont nécessaires. D'une part, nous présenterons les sources et puits qui vont être déterminant dans l'évolution du méthane. D'autre part, nous exposerons les conditions choisies pour permettre la simulation de ce polluant avec le modèle Polair3D.

6.6.1 Sources du méthane

Emissions

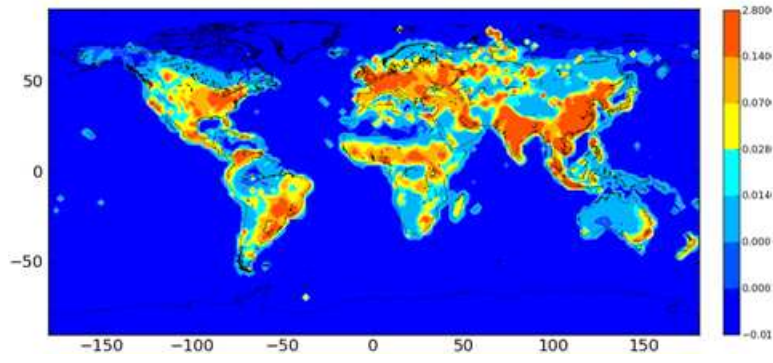
Pour mieux connaître et simuler la dispersion du méthane dans l'atmosphère, il est nécessaire de savoir quelles sont les sources d'émissions, de les identifier et les quantifier. Le méthane est généralement émis à la surface de la terre. L'origine des émissions peut être naturelle ou issue de l'activité humaine.

Les sources naturelles de méthane sont situées dans les zones en anaérobiose (absence d'oxygène) où se décomposent des matières organiques sous l'effet de micro-organismes: les forêts tropicales, les eaux stagnantes . Ces matières organiques sont transformées en un gaz composite dans lequel se trouvent en proportion variable le méthane CH_4 , le carbone CO_2 , le NH_3 et le sulfure d'hydrogène H_2S . On parle de pyrolyse de la matière.

Les principales sources anthropiques (issues de l'activité humaine) du méthane correspondent à l'exploitation massive de combustibles fossiles (pétrole, charbon, gaz naturel), la combustion de biomasse, les rizières, les décharges, les animaux domestiques.

Les inventaires d'émissions

L'augmentation de la concentration de méthane dans l'atmosphère est liée à toutes ces émissions. Les inventaires d'émissions sont les données utilisées pour prendre en compte ces émissions dans une simulation. Un inventaire d'émission est une évaluation de la quantité d'une substance polluante produite par un émetteur donné pour une zone géographique et une période de temps donnée. Dans notre simulation, l'inventaire d'émission doit recouvrir tout le globe terrestre. Nous avons utilisé pour notre simulation les inventaires provenant de ... La figure 6.6.1 illustre les émissions du méthane sur une année. L'unité est en $\mu\text{g.m}^{-2}$. On observe des fortes valeurs d'émissions notamment au niveau de l'Asie, de l'Europe et sur les côtes atlantiques des Amériques..



Fig_6.6.1_ Emissions du méthane sur le globe

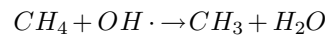
6.6.2 Puits du méthane

Une fois émis dans l'atmosphère qu'advient-il du méthane ? Il est primordial de savoir quels sont les mécanismes entraînant l'élimination du méthane car ce sont eux qui peuvent contrebalancer l'effet des émissions sur la concentration du méthane.

L'élimination du méthane se produit principalement lors de réactions chimiques. Le méthane disparaît de l'atmosphère essentiellement par oxydation par les radicaux OH dans la troposphère. Il s'oxyde également dans la stratosphère avec l'ozone et réagit avec le radical chlore Cl dans des proportions plus petites. La réaction avec le radical hydroxyle OH étant le principal puits de méthane, la simulation du méthane ne prendra en compte que ce processus.

Oxydation par le radical OH

Cette réaction chimique s'écrit :



A priori dans Polair3D, le module de chimie est dédié à la prise en compte de ce type de processus chimique. Cependant, pour des raisons de simplifications et de temps de calcul nous avons préféré ajouter cette évolution de la concentration de méthane directement dans le module d'advection. Pour ce faire nous nous sommes intéressés plus particulièrement à la cinétique chimique. Le terme de perte de la concentration issu de la réaction chimique entre le méthane et le radical hydroxyle, peut être représenté par la loi de vitesse la suivante :

$$\frac{d[CH_4]}{dt} = -k \cdot [CH_4] \cdot [OH \cdot]$$

où k est la constante de réaction chimique $[CH_4]$ et $[OH \cdot]$ sont les concentrations associées aux espèces chimiques.

En introduisant une discrétisation du pas de temps et une approximation du terme dérivé nous avons pu approcher l'équation précédente par le schéma :

$$[CH_4]^{n+1} = [CH_4]^n - k \Delta_t [CH_4]^n [OH \cdot]^n$$

où $[\text{CH}_4]^n$, $[\text{OH}\cdot]^n$ représentent les concentrations de méthane et du radical hydroxyle au temps t_n et $[\text{CH}_4]^{n+1}$ la concentration au temps t_{n+1} .

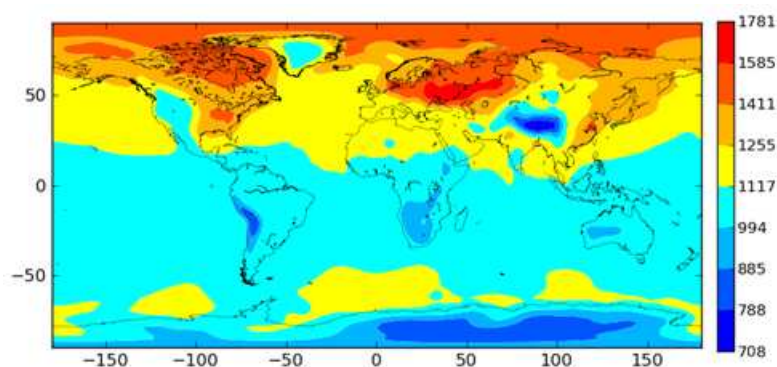
Ce schéma est intégré au module d'advection dans le cas de notre simulation du méthane. Les données nécessaires pour calculer cette évolution sont la constante de réaction k et la concentration du radical hydroxyle. La constante k dépend de la température. Toutefois, pour simplifier la simulation nous avons retenu cette constante pour une valeur moyenne de la température sur l'année. De même, pour la concentration du radical hydroxyle, nous utiliserons la concentration moyenne sur une année. Cette concentration est donnée par le modèle de chimie transport global MOZART.

6.6.3 Les caractéristiques de la simulation

La simulation de la dispersion du méthane ont lieu sur une année. Pour effectuer cette simulation d'autres données que celles présentées précédemment, sont nécessaires. Nous avons introduit les données d'entrée dans la section 4.1.1 (Preprocessing), dans le modèle global, ces dernières prennent toute leur importance dans notre simulation. En effet, les résultats de la simulation vont être déterminés par la disponibilité et la fiabilité des données utilisées. La grille de simulation est la même que celle du cas test de la section 6.6 sauf que l'on a rajouté 3 niveaux d'étude. Les données d'entrées correspondent à l'année 2002. Le pas de temps choisi est de 20 minutes.

Les données d'entrées

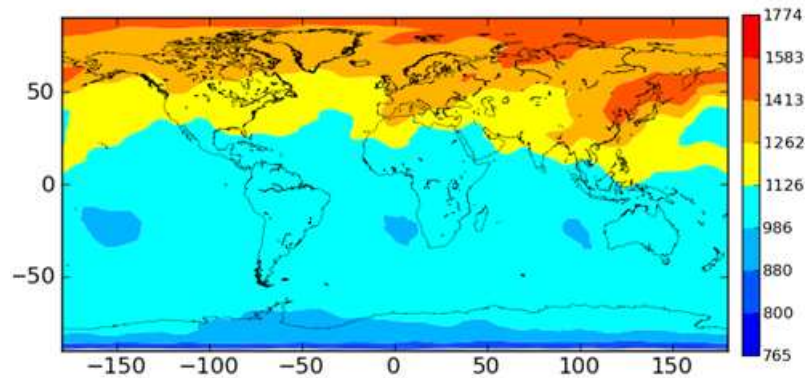
Nous avons récupéré les données météorologiques chez l'organisme ECMWF introduit dans la section 6.4.1 (Etude des vents). De plus, des conditions initiales de méthane sont nécessaires pour suivre l'évolution du méthane dans l'atmosphère. Si les simulations avaient été effectuées sans conditions initiales, la comparaison de leur résultat avec des mesures de concentrations du méthane n'aurait pu être possible. La figure 6.6.2 représente ces conditions initiales.



Fig_6.6.2_ Conditions initiales de méthane

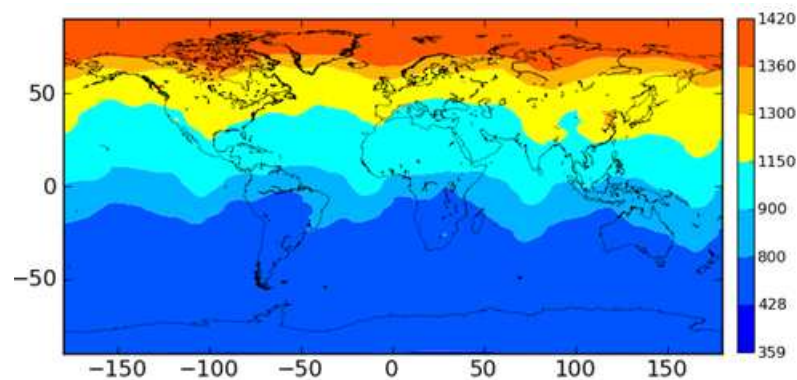
6.6.4 Les résultats de la simulation

De nombreuses simulations ont été nécessaires pour déterminer les paramètres permettant la bonne dispersion des polluants, tout en ayant des ordres de grandeur cohérents. Par exemple, les niveaux de hauteur ont été un facteur déterminant dans les simulations. En effet, si les niveaux étaient trop faibles, que le domaine d'étude se situe par exemple dans les 100 premiers mètres de l'atmosphère; le méthane aura tendance à s'accumuler dans ce domaine. Finalement après quelques simulations, nous obtenons des résultats qui semblent relativement cohérents par rapport à l'ordre de grandeur du méthane, et des différents processus ayant lieu dans l'atmosphère. Nous avons choisi quelques images permettant de suivre l'évolution de la concentration du méthane. Voici les figures associées. Les concentrations sont en $\mu g.m^{-3}$.



Fig_6.63_ T=20 jours

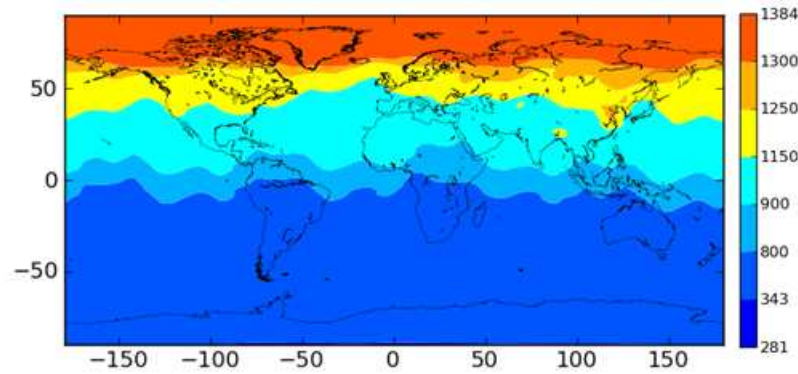
Au bout de 20 jours, les concentrations deviennent plus homogènes. En effet, au pôle sud les concentrations initiales étaient basses aux environs de l'Antartique, ce n'est alors. De même pour le reste du globe ou des zones de concentrations faibles ont disparues (exemple l'Asie centrale).



Fig_6.6.4_ T=6 mois

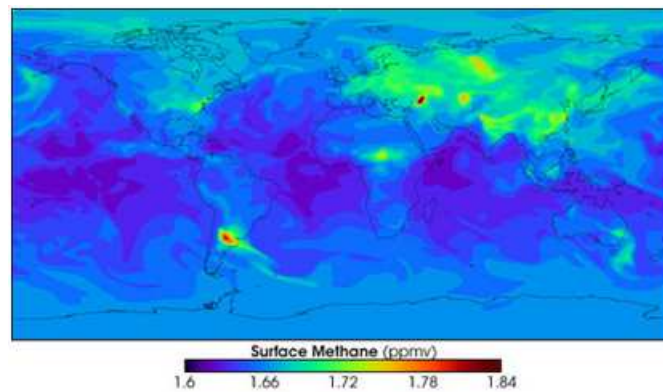
Sur cette figure, on observe que l'homogénéisation des concentrations se poursuit mais on remarque que ce brassage a lieu surtout horizontalement. Les concentrations du méthane diminuent avec la latitude. Le mélange n'est pas effectué verticalement.

Les concentrations obtenues à la fin de notre simulation sont illustrés par la figure suivante.



Fig_6.6.5_ T=1 an

Ces résultats sont comparés aux résultats des simulations effectués par le modèle global de la NASA.



Fig_6.6.6_ Concentration du méthane

Les résultats ont les mêmes ordres de grandeur car l'unité des concentrations issues de la simulation est le $\mu g.m^{-3}$, ici $1400\mu g.m^{-3}$ de méthane correspond à 2.1 ppm. La valeur maximale obtenue par la NASA est 1.84 ppm. Les concentrations issues de notre simulation sont beaucoup moins homogènes que sur la carte de la NASA. En effet, l'écart entre les concentrations maximum et minimum est de 1.6 ppm, tandis que l'écart pour les concentrations de la NASA est de 0.16 ppm. Cette différence peut s'expliquer par l'écart présent dans les concentrations initiales utilisées pour le méthane. En effet, si on retourne à la Fig 6.6.2, nous observons que cet écart entre les concentrations maximum et minimum était déjà présent ($1000\mu g.m^{-3}$ de différence dans les concentrations initiales et les concentrations finales).

Mêmes si les similitudes entre les concentrations de la NASA et celles issues de notre simulation sont relativement faibles, la méthode du maillage réduit est validée. En effet en ce qui concerne le transport sur le globe et au-delà des pôles aucun problème numérique n'est apparu. Le polluant se disperse surtout horizontalement mais ceci provient des vents d'entrées et non de la méthode numérique.

7 CONCLUSION

Durant ce stage, j'ai été confrontée à des obstacles inhérents à la modification du modèle Polair3D, et ce afin de mener à bien l'étude de la dispersion de polluants à l'échelle globale. Les spécificités du modèle ont conditionné le choix des méthodes numériques permettant la simulation globale. Ces méthodes ont été soumises à deux contraintes : elles devaient être développées et testées durant la période du stage, et elles devaient assurer le respect de la condition CFL tout en conservant des temps de calcul raisonnables.

Deux méthodes principales ont été développées au cours du stage : l'adaptation simple de Polair3D à la modélisation globale, et la méthode du maillage réduit. Ces méthodes ont été testées afin d'en déterminer les limites.

Le respect de la condition CFL a limité la première méthode. En effet, le pas de temps -de l'ordre de la minute - imposé par cette méthode pour s'affranchir des instabilités numériques engendrait un temps de calcul trop important.

La deuxième méthode a montré son efficacité : elle permet de s'affranchir de toute contrainte, et plus particulièrement elle assure le respect de la condition CFL, même dans des conditions extrêmes (vents maximum). Ainsi, le risque d'obtenir des instabilités numériques reste relativement faible avec cette méthode.

La dernière étape du stage consistait à évaluer le modèle global associé à la méthode retenue, en simulant la dispersion du méthane dans l'atmosphère. Des simplifications ont été nécessaires pour lancer cette simulation pour un temps de calcul raisonnable. Les résultats obtenus ont les mêmes ordres de grandeur que les mesures globales de méthane. Cependant, de nombreux paramètres doivent être pris en compte pour que les résultats de simulation de polluants avec Polair3D soient comparables aux mesures existantes de ces polluants.

Enfin, la méthode du maillage réduit, ajoutée à Polair3D, permet d'effectuer des simulations du transport de polluants sur tout le globe, l'objectif du stage est donc atteint. Ce travail constitue donc une base pour automatiser la modélisation globale dans Polair3D.

Toutefois, une phase de validation reste encore nécessaire avant que ne soient réalisés, sous Polair3D, des études fiables de transport de polluants à l'échelle globale.

Bibliographie

- [1] A.Kageyama. The 'yin-yang grid': an overset grid in spherical geometry. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 5(9), Sep 2004.
- [2] V. Mallet B. Sportisse. *Cours Calcul Scientifique pour l'environnement*.
- [3] D.Garaud. *Estimation des incertitudes et prévision des risques en qualité de l'air*. PhD thesis, Ecole des ponts et Chaussees, 2011.
- [4] W. Hundsdorfer J. Blom. Vectorization aspects of a spherical advection scheme on a reduced grid. *Physical Review*, 91(1), Jul 1998.
- [5] Stephen M.Griffies et All. A technical guide to mom4. Technical Report, 1998.
- [6] E.J Spee et J.G Verwer. A numerical study for global atmospheric transport chemistry problems. , 91(1), Aug 1998.
- [7] V.Mallet. *Estimation de l'incertitude et prévision d'ensemble avec un modèle de chimie-transport*. PhD thesis, Ecole des ponts et Chaussées, 2005.

Sources des images

Source de la couverture : www.ipsl.fr

Source 1 : www.leaner.org/courses/envsci/unit/text.php?unit=2&secNum=2

Source 2 : Thèse I.Korsakissok, Changements d'échelle en modélisation de la qualité de l'air et estimation des incertitudes associées, Page25.

Source 3 : Article. Polyphemus une plate-forme multimodèles pour la pollution atmosphérique et l'évaluation des risques

Source 4 : <http://istockphoto.com>

Source 5 : [3]

Source 6 : <http://fr.academic.ru/dic.nsf/frwiki/1377113>

Source 7 : http://www.research.kobe-u.ac.jp/csi-viz/members/kageyama/yin_yang_grid/index.html

Source 8 : <http://climate.gmu.edu/poseidon/code/Tripole.html>

Source 9 : <http://earthobservatory.nasa.gov/IOTD/view.php?id=5270>

Source 10 : [6]

8 Annexe

8.1 Vent rigidifiant

On donne ici les expressions d'un champ de vecteurs rigidifiant sur la sphère, c'est à dire d'un champ de vitesses déterminant une rotation. On introduit les composantes zonale et méridionale du vent (u, v) qui correspondent aux coordonnées géographiques. On considère un vecteur rotation de coordonnées cartésiennes (a, b, c) . On obtient alors :

$$v = a \sin(\phi)$$

$$\begin{aligned} u &= c \cos(\lambda) - \sin(\lambda)(a \cos(\phi) + b \sin(\phi)) \\ v &= a \sin(\phi) - b \cos(\phi) \end{aligned}$$

La rotation qui nous interesse en l'occurence est celle autour de l'axe des y . Le vecteur rotation correspondant est le suivant $(0, b, 0)$. Les coordonnées géographiques du vent correspondant est donc :

$$\begin{aligned} u &= b \sin(\lambda) \sin(\phi) \\ v &= b \cos(\phi) \end{aligned}$$

8.2 Algorithme de construction du maillage réduit

L'algorithme de construction est le suivant :

Algorithme 1

Entrées

$\Delta\phi_{\text{init}}$: pas d'espace correspondant au maillage d'entrée.

$\Delta\phi_i$: pas d'espace en λ_i du maillage réduit

N_{fus} : vecteurs contenant les indices où $\Delta\phi_i$ double

Initialisation

$\Delta\phi_i = \Delta\phi_{\text{init}} \forall i$

$i = 0$

$N_{\text{fus}} = \{\emptyset\}$

Tant que :

$$N_i \equiv 0 [2] \text{ et } i \leq N_y$$

Faire :

Si :

$$\frac{1}{\Delta\phi_i \cos(\lambda_i)} \geq 2$$

Alors :

$$\begin{aligned} p &= p + 1 \\ \Delta\phi_j &= \Delta\phi_{\text{init}} \times 2^p \text{ pour } j = i, N_y \\ N_i &= N_i / 2 \\ N_{\text{fus}} &\leftarrow [N_{\text{fus}}, i] \end{aligned}$$

Fin Si

$i \leftarrow i + 1$

Fin Tant que