

CNRS - Université Pierre et Marie Curie - Université Versailles-Saint-Quentin CEA - IRD - Ecole Normale Supérieure - Ecole Polytechnique

Institut Pierre Simon Laplace

des Sciences de l'Environnement Global

Notes Techniques du Pôle de Modélisation

Quel Schéma Numérique pour le Transport d'Organismes Biologiques par la Circulation Océanique ?

Audrey Estublier et Marina Lévy

Laboratoire d'Océanographie DYnamique et de Climatologie



Quel Schéma Numérique pour le Transport d'Organismes Biologiques par la Circulation Océanique ?

Audrey Estublier

Laboratoire d'Océanographie Dynamique et de Climatologie, Paris, France (CNRS/IRD/UPMC)

Rapport de Stage de l'Ecole Centrale Nantes **encadré par Marina Lévy** Option hydrodynamique et génie océanique

Table des matières

Re	emerciements	3	
Introduction			
1	Environnement de l'étude 1.1 Présentation de l'IPSL 1.2 Présentation du LODYC 1.2 Le code OPA	6 6 7	
2	Les traceurs passifs 2.1 Equation d'évolution d'un traceur passif 2.2 Forme conservative de l'équation d'advection 2.3 Les schémas numériques d'advection 2.4 Conditions limites 2.4.1 Le masquage des terres 2.4.2 Cas non-périodique 2.4.3 Cas périodique 2.5 Schémas temporels associés	10 10 12 12 12 14 14 15 15 15	
3	Le schéma numérique d'Arakawa3.1Principe de la méthode3.2Discrétisation spatiale	17 17 17	
4	Le schéma numérique de Smolarkiewicz4.1Principe de la méthode4.2Discrétisation spatiale	18 18 18	
5	Le schéma TVD de Zalesak5.1Principe de la méthode5.2Discrétisation spatiale	20 20 20	
6	Le schéma MUSCL6.1Principe de la méthode6.2Discrétisation spatiale	23 23 23	

	6.3	Conditions limites	27	
7	Le s 7.1 7.2 7.3	chéma PPM Principe de la méthode	 28 28 28 31 	
8	Le d 8.1 8.2	codage des schémasMise au point du codage des schémas sur un cas symétrique .8.1.1 présentation du cas	33 33 33 34 37	
9	Con 9.1 9.2	nparaison des schémas sur un cas test simple Présentation du cas	39 39 40	
10	Con stab 10.1 10.2	mparaison des schémas en 3D : un front périodique in- ble avec biologiePrésentation du cas-testEtude comparative des schémas10.2.1 Résultats physiques10.2.2 Comparaison des schémas numériques	48 48 48 48 49	
Conclusion				
AI	NNE	XE 1 : Diffusion horizontale	74	
AI	NNE	XE 2 : Arakawa avec diffusion horizontale bilaplacienne	75	
ANNEXE 3 : Upstream avec diffusion horizontale bilaplacienne				
AI	NNE	XE 4 : TVD avec diffusion horizontale bilaplacienne	77	
AI	NNE	XE 5 : MUSCL avec diffusion horizontale bilaplacienne	78	

Remerciements

J'ai eu la chance de bénéficier lors de ces quatre mois et demi passés au LODYC d'un encadrement, d'une aide et d'un soutien exceptionnels. Je te remercie Marina pour ta grande disponibilité et ta patience. Ton dynamisme et ton optimisme m'ont encouragés tout au long de ce stage et je ne parlerai pas des dépannages informatiques qui m'ont été d'un grand secours.

Je tiens à remercier aussi Laurent Mémery pour m'avoir accepté dans son équipe et Laurent Mortier, Gurvan Madec et Frédéric Hourdin qui ont bien voulu répondre à mes multiples questions.

Enfin, la vie n'aurait pas été aussi agréable sans Jean-Michel André et Elodie qui ont partagé mon bureau durant ce stage.

Introduction

Les organismes planctoniques de petite taille sont pour la plupart sans mobilité propre, et transportés par le courant. Au premier échelon trophique, le phytoplancton a besoin pour croître d'éléments nutritifs (entre autres de nitrates) qui sont abondants au fond de l'océan, mais rapidement épuisés en surface. En effet, l'éclairement s'atténuant rapidement avec la profondeur, la photosynthèse ne peut avoir lieu que dans la couche océanique de surface. Les cycles biogéochimiques marins sont donc fortement contraints par la dynamique océanique, qui d'une part contrôle l'apport de nutritifs vers la surface et donc la production primaire, et d'autre part modifie la distribution du plancton, et en particulier du phytoplancton. Dans les modèles biogéochimiques, l'évolution dans le temps et dans l'espace des concentrations de plancton et de nutritifs est donc régie par des équations d'advection-diffusion, forcées par des termes source ou puits liés aux intéractions biologiques entre les traceurs.

Dans le modèle OPA, l'équation d'advection des traceurs actifs (i.e. agissant sur la dynamique du système) est résolue numériquement en utilisant le schéma spatial d'Arakawa associé à un schéma temporel centré "sautemouton". Ce schéma est d'ordre deux en espace et en temps. Pour assurer sa stabilité, il est nécessaire de lui adjoindre explicitement une diffusion (spatiale et temporelle). Il présente deux défauts principaux, il est non monotone et peut conduire à l'apparition de nombreux minima et maxima secondaires. Il n'est donc pas adapté au calcul de l'advection de traceurs passifs "biologiques", champs positifs et souvent proches de zéro, car il ne peut préserver leur positivité. Or, l'équation d'advection des traceurs passifs doit nécessairement se faire par l'intermédiaire d'un schéma défini positif. Jusqu'à présent, elle se faisait dans le modèle OPA-TRACEUR par la méthode "Flux Corrected Transport"(FCT) (Smolarkiewicz and Clark [1986]). Ce schéma est conservatif, mais dissipatif.

Actuellement, la représentation de forts gradients en modélisation océanographique, tels que les fronts entre des masses d'eau différentes ou les côtes, est un véritable défi pour les numériciens. L'équipe de modélisation des cycles biogéochimiques du LODYC souhaitant améliorer la simulation des fronts, ce stage de 4 mois a été l'occasion d'intégrer de nouveaux schémas qui soient à la fois conservatifs, monotones, et pas trop dispersifs, ni trop coûteux en temps CPU et conservant avec une bonne précision les extrema du champ transporté au niveau des fronts.

Comprendre et simuler l'océan possède des similitudes avec le problème de prévision du temps. C'est sans doute pour cela que, historiquement, beaucoup de techniques utilisées dans le domaine de la météorologie ont été appliquées au problème océanographique. Ainsi, ce travail fut réalisé à partir d'articles de météorologie décrivant des études faites sur des schémas numériques.

Après une brève présentation de l'environnement de l'étude et du code OPA, nous nous intéresserons plus particuliérement au traceur passif et aux schémas numériques développés dans OPA. Puis, un cas-test simple mettra en evidence les caractéristiques de chacun. Enfin, nous terminerons notre étude par le cas d'un front périodique instable avec biologie.

Environnement de l'étude

Le code OPA a été développé au Laboratoire d'Océanographie DYnamique et de Climatologie (LODYC), et de l'Institut Pierre Simon Laplace (IPSL).

1.1 Présentation de l'IPSL

L'Institut Pierre-Simon-Laplace des Sciences de l'Environnement Global (IPSL) a été créé en tant que Fédération d'Unités par le CNRS le 1er Janvier 1994. Son rôle est de mettre en place des services scientifiques permettant une rationalisation des moyens et une meilleure efficacité dans la conduite des activités de recherche.

Il regroupe six laboratoires de recherche localisés en région parisienne :

- Le Centre d'études des Environnements Terrestre et Planétaires (CETP)
- Le Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD)
- Le Laboratoire de Physique et Chimie Marines (LPCM)
- Le Laboratoire d'Océanographie DYnamique et de Climatologie (LODYC)
- Le Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (LSCE)
- Le Service d'Aéronomie (SA)

1.2 Présentation du LODYC

Le LODYC est une Unité Mixte de Recherche (UMR 7617) dépendant du CNRS, département des Sciences de l'Univers, de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), et de l'Institut de Recherche pour le Développement (IRD). Il regroupe quelque 80 chercheurs, enseignants-chercheurs, ingénieurs, techniciens, administratifs et thésitifs localisés à Jussieu.

La vocation première du LODYC est l'étude des processus dynamiques gouvernant la circulation océanique, la compréhension des mécanismes gouvernant l'évolution du système climatique terrestre où l'océan joue un rôle important et l'étude des cycles biogéochimiques océaniques, en particulier celui du carbone, qui mettent en jeu, entre autres, la biosphère marine.

- Les principaux projets du laboratoire relèvent :
- d'une activité expérimentale fondée sur l'implication forte du LODYC dans les campagnes à la mer;
- d'une activité de développement instrumental;
- de l'interprétation conjointe des observations spatiales et in situ;
- d'une activité de modélisation théorique, conceptuelle et statistique avancée, liée à l'interprétation des données;
- d'une activité de modélisation numérique, le laboratoire ayant développé un modèle de circulation générale océanique : OPA.

Le laboratoire participe activement à l'enseignement supérieur et l'accueil de thésitifs dans les domaines de l'océanographie, de la climatologie et de l'étude des cycles biogéochimiques océaniques.

1.3 Le code OPA, version 8.1

L'océanographie dynamique est une science récente. La structure détaillée des courants, les déplacements de masse d'eau, et la répartition des propriétés physiques et chimiques dans la mer sont loins d'être bien compris. Les processus physiques qui conduisent les courants et déterminent les propriétés physiques de l'eau de mer sont nombreux, complexes et se produisent au travers d'un vaste spectre spatio-temporel. Ils résultent de la circulation induite par l'action du vent sur la surface de la mer et de la circulation liée à l'hétérogénité de la température et de la salinité.

OPA (Océan PArallélélisé) [7] est un modèle aux équations primitives de la circulation océanique régionale et globale (OGCM, Ocean General Circulation Model) qui a été développé au Laboratoire d'Océanographie DYnamique et de Climatologie. Il permet d'étudier sur un vaste spectre spatio-temporel l'océan et ses intéractions avec les autres composantes du système climatique terrestre (atmosphère, glace de mer, traceurs biogéochimiques, ...). Ainsi, on résout les équations primitives avec des choix physiques et algorithmiques très variés. L'art de la modélisation consiste à choisir les meilleurs parametres et les algorithmes les plus efficaces sur un ordinateur donné pour étudier un problème particulier.

Les équations primitives

L'océan est un fluide dont les caractéristiques sont déterminés par les équations primitives, ie les équations de Navier-Stockes avec une équation d'état non-linéaire qui relie la température et la salinité à la vitesse du fluide par l'intermédiaire de la densité.

Le modèle OPA est défini avec les approximations suivantes :

- l'approximation de la sphéricité de la Terre
- l'approximation "couche mince" : la profondeur de l'océan est négligée par rapport au rayon de la Terre
- hypothèse de la fermeture turbulente : les tenseurs turbulents sont supposés être proportionnels aux gradients dynamiques et thermodynamiques à grande échelle
- hypothèse de Boussinesq : les variations de la masse volumique sont négligées dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement horizontale
- hypothèse hydrostatique : seuls la gravité et le gradient vertical de pression sont pris en compte dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement verticale.
- hypothèse d'incompressibilité (d'où une vitesse non divergente)

Il est fréquent d'utiliser un système unitaire (i,j,k) de vecteurs orthogonaux liés à la Terre du fait de l'importance de la force gravitationnelle dans les équations de mouvement à grande échelle. Ainsi k est le vecteur local dirigé vers le haut et (i,j) deux vecteurs orthogonaux à k.

Les différentes variables sont définies de la manière suivante :

- U le vecteur vitesse, U_h le vecteur vitesse sur l'horizontale (sur le plan (i,j)) et w le vecteur vitesse sur la verticale avec $U = U_h + w\mathbf{k}$
- $\bullet~T$ la température
- ρ la densité in-situ
- p la pression

Voici les principales équations du modèle dans le repère (i, j, k) : L'équation de conservation du moment :

$$\frac{\partial U_h}{\partial t} = -\left[(\nabla \wedge U) \wedge U + \frac{1}{2}\nabla(U^2)\right]_h - f * k * U_h - \frac{1}{\rho_o}\nabla_h p + D^U \qquad (1.1)$$

L'équilibre hydrostatique :

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \tag{1.2}$$

L'incompressibilité :

$$\nabla . U = 0 \tag{1.3}$$

La conservation de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla . (TU) + D^T \tag{1.4}$$

La conservation de la salinité :

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\nabla .(SU) + D^S \tag{1.5}$$

L'équation d'état :

$$\rho = \rho(T, S, p) \tag{1.6}$$

avec ∇ le gradient dans les directions (**i**, **j**, **k**), t le temps, z la coordonnée verticale, ρ_o une densité de référence, f l'accélération de Coriolis ($f = 2\Omega.k$, avec Ω le vecteur de vitesse angulaire de rotation de la Terre), g l'accélération de la gravité et D^i le terme de diffusion pour la variable i.

La présentation du code OPA ayant été faite, intéressons-nous plus particulièrement aux traceurs passifs, objet de notre étude.

Les traceurs passifs

La température et la salinité sont des traceurs thermodynamiques actifs. En effet, ils rétroagissent sur la dynamique. En revanche, un traceur passif est transporté par la circulation sans rétroaction sur cette dernière. Les traceurs passifs de l'océan sont typiquement biogéochimiques, biologiques ou radioactifs. Ils sont transportés par la circulation océanique, mais ils peuvent aussi se dégrader ou intéragir entre eux. L'équation d'évolution des traceurs passifs est résolue suivant une approche eulérienne pour des valeurs moyennes sur le pas de la grille. On suit l'évolution de la concentration d'un traceur en un point fixe, par opposition à une approche lagrangienne qui suit l'évolution d'une particule le long de sa trajectoire.

2.1 Equation d'évolution d'un traceur passif

L'évolution d'un traceur passif suit l'équation suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = S(T) - \frac{1}{e_1 e_2 e_3} \left[\frac{\partial (e_2 e_3 T u)}{\partial i} + \frac{\partial (e_1 e_3 T v)}{\partial j} + \frac{\partial (e_1 e_2 T w)}{\partial k} \right] + D^{lc} + D^{vc}$$
(2.1)

S, le premier terme du côté droit, est le terme source/puits lié au traceur. Le second terme (terme entre crochets) représente l'advection du traceur par la vitesse (u,v,w); e_1 , e_2 , e_3 et i, j et k sont respectivement les facteurs d'échelle et les indices dans les trois directions. Le troisième terme représente la diffusion horizontale et le quatrième terme, la diffusion verticale.

L'objet de cette étude est la résolution numérique du terme d'advection.



FIG. 2.1: Grille de calcul



FIG. 2.2: Grille de calcul dans la direction $\mathbf x$

2.2 Forme conservative de l'équation d'advection

L'équation (2.1), si on ne conserve que les termes d'advection, prend la forme conservative semi-discrète suivante sur la grille de calcul (Fig 2.1 et 2.2) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_i \left[e_{2u}e_{3u}u\tilde{T} \right] + \delta_j \left[e_{1v}e_{3v}v\tilde{T} \right] + \delta_k \left[e_{1T}e_{2T}w\tilde{T} \right] \right) (2.2)$$

où $\delta_i[F] = F_{i+1/2} - F_{i-1/2}$ est la divergence du flux F ($F = e_{2u}e_{3u}u\tilde{T}$ pour la direction x) dans la boite centrée en i. Ces flux sont définis sur la grille (Fig 2.1) aux points i - 1/2 et i + 1/2 (Fig 2.2), c'est à dire aux points vitesse. Pour les estimer, il est donc nécessaire de connaître la valeur du traceur en ces points (que l'on notera \tilde{T}).

Avec, $b_T = e_{1T}e_{2T}e_{3T}$, $U = e_{2u}e_{3u}u$, $V = e_{1v}e_{3v}v$ et $W = e_{1T}e_{2T}w$, l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{b_T} \left(\delta_i \left[U\tilde{T} \right] + \delta_j \left[V\tilde{T} \right] + \delta_k \left[W\tilde{T} \right] \right)$$
(2.3)

2.3 Les schémas numériques d'advection

Les schémas numériques d'advection décrits en plus de détails dans la suite de ce document, se distinguent essentiellement par le choix de \tilde{T} . Chaque dimension étant traitée indépendamment des deux autres, nous nous limiterons au cas 1D. La forme générale de \tilde{T} dans la direction i pour chaque schéma est :

• Arakawa

$$F_{i+1/2}^{ara} = U_{i+1/2} \tilde{T}_{i+1/2}^{ara}$$
$$\tilde{T}_{i+1/2}^{ara} = \frac{T_i + T_{i+1}}{2}$$
(2.4)

• Upstream

$$F_{i+1/2}^{ups} = U_{i+1/2} \tilde{T}_{i+1/2}^{ups}$$
(2.5)

$$\tilde{T}_{i+1/2}^{ups} = \begin{cases} T_i & \text{si } U_{i+1/2} \ge 0\\ T_{i+1} & \text{si } U_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$
(2.6)

• Smolarkiewicz, dit méthode FCT

Cette méthode consiste en une série d'upstream, le premier en utilisant le champ de vitesse réel et les suivants avec des vitesses antidiffusives qui sont estimées.

• TVD

$$F_{i+1/2}^{tvd} = F_{i+1/2}^{ups} + C_{i+1/2} (F_{i+1/2}^{ara} - F_{i+1/2}^{ups})$$
(2.7)

La méthode repose sur le calcul du limiteur de flux $C_{i+1/2}$ (constante comprise entre 0 et 1) à chaque point.

• MUSCL

$$F_{i+1/2}^{mus} = U_{i+1/2} \tilde{T}_{i+1/2}^{mus}$$
(2.8)

$$\tilde{T}_{i+1/2}^{mus} = \begin{cases} T_i + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{e_{1u,i+1/2}}\right) \delta_i T & \text{si } U_{i+1/2} \ge 0\\ T_{i+1} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{e_{1u,i+1/2}}\right) \delta_{i+1} T & \text{si } U_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$
(2.9)

où Δt est le pas de temps et $\delta_i T$ la pente de la droite qu'il faudra estimer.

• PPM

$$F_{i+1/2}^{ppm} = U_{i+1/2} \tilde{T}_{i+1/2}^{ppm}$$
(2.10)

$$\tilde{T}_{i+1/2}^{ppm} = \begin{cases} T_{R,i} - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{2\Delta x_i} (\Delta T_i - (1 - \frac{2}{3} \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{\Delta x_i}) T_{6,i}) & \text{si } U_{i+1/2} \ge 0\\ T_{L,i} - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{2\Delta x_i} (\Delta T_{i+1} + (1 + \frac{2}{3} \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{\Delta x_i}) T_{6,i+1}) & \text{si } U_{i+1/2} < 0\\ (2.11) \end{cases}$$

où $T_{R,i}$ est la valeur extrapolée du traceur T_i au point i + 1/2 et $T_{L,i}$ au point i - 1/2; Δx_i est égale à e_{1T} au point i (voir Fig 2.2) et $T_{6,i}$ est une valeur en fonction de T_i , $T_{R,i}$ et $T_{L,i}$ à déterminer.

2.4 Conditions limites

2.4.1 Le masquage des terres

Contrairement à la météorologie où les bords ne sont que la terre et une limite du ciel que l'on s'est fixée, en océanographie, les côtes sont une difficulté supplémentaire dans la résolution numérique. Un système de masque permet de repérer les mailles terrestres.



FIG. 2.3: Exemple de masque

Toutes ces cellules masquées ont un flux sortant nul (Fig 2.4) car $\overline{U}.\overline{n} = 0$ aux bords.



FIG. 2.4: Flux sortant d'une cellule masquée

2.4.2 Cas non-périodique

Seuls les schémas MUSCL et PPM (schémas d'ordre supérieur à deux) nécessitent un traitement particulier près des points masqués (voir paragraphes 6.3 et 7.3).

2.4.3 Cas périodique

Si l'on souhaite étudier un cas périodique dans la direction i, les flux sont calculés de 2 à jpi-1. Les valeurs en 1 et jpi sont obtenues par la condition de périodicité suivante (Fig 2.5) :



FIG. 2.5: Cas périodique

Dans les cas de MUSCL et PPM, la périodicité prend en compte un nombre plus important de points (voir paragraphes 6.3 et 7.3).

2.5 Schémas temporels associés

Le schéma temporel utilisé pour les méthodes Arakawa et TVD, est le schéma "saute mouton" ou "leapfrog"(équation 2.13). Il est largement utilisé pour les processus d'advection des fluides à faible viscosité. C'est un schéma d'ordre 2 qui est inconditionnellement stable. De plus, il ne produit pas de bruit numérique et n'amplifie pas les oscillations. Il n'est pas adapté pour les schémas à forte diffusion numérique tel que les schémas de Smolarkiewicz, mais est très efficace pour le schéma d'Arakawa. Cependant, ces avantages sont largement diminués par le problème de divergence des solutions des pas de temps pairs avec les solutions des pas de temps impairs. On peut contrôler ce problème en utilisant le filtre d'Asselin qui crée une troisième solution à partir des deux autres. Cette stratégie diminue l'ordre du schéma temporel : ordre 1.

$$T(t + \Delta t) = T(t - \Delta t) + 2\Delta t F[T(t), U(t)]$$
(2.13)

où F représente le terme de tendance.

Les autres schémas numériques (Smolarkiewicz, MUSCL et PPM) utilisent le schéma avant :

$$T(t + \Delta t) = T(t) + \Delta t F[T(t), U(t)]$$
(2.14)

Dans le cas des traceurs actifs, la méthode FCT nécessite par construction un schéma de discrétisation temporel avant que l'on stabilise en centrant en temps les vitesses. Les schémas MUSCL et PPM utilisés pour les traceurs passifs suivront par construction ce même schéma :

$$T(t + \Delta t) = T(t - \Delta t) + 2\Delta t F[T(t - \Delta t), U(t)]$$
(2.15)

Le schéma numérique d'Arakawa

3.1 Principe de la méthode

Le schéma d'Arakawa est un schéma d'ordre 2 en espace. Il est conservatif (il conserve l'intégrale du traceur sur le domaine) et non dissipatif (il conserve l'intégrale du carré du traceur, c'est à dire la variance).

3.2 Discrétisation spatiale

$$\tilde{T}_{i+1/2}^{ara} = \frac{T_i + T_{i+1}}{2} \tag{3.1}$$

Le schéma numérique de Smolarkiewicz

4.1 Principe de la méthode

Le schéma Upstream est d'ordre 1 en espace. Il est conservatif et très diffusif. Le schéma de Smolarkiewicz [9] (ou méthode FCT pour Flux Corrected Transport) utilisé sur un traceur passif T consiste à advecter une première fois ce traceur avec le flux de masse U au moyen d'un schéma "Upstream". On obtient alors des concentrations intermédiaires de traceurs à partir desquelles on calcul un flux de masse antidiffusif $U^{(1)}$. On advecte ensuite ces concentrations intermédiaires par un autre schéma 'Upstream' avec les flux de masse $U^{(1)}$. (1) représente le numéro de la phase corrective que l'on peut répéter autant de fois qu'on le désire. La méthode consiste donc à corriger le schéma upstream par un terme antidiffusif qui s'oppose à sa diffusion implicite.

4.2 Discrétisation spatiale

Pour la discrétisation spatiale, nous introduisons la notation suivante :

$$q^{+} = \frac{1}{2}(q + |q|) \tag{4.1}$$

$$q^{-} = \frac{1}{2}(q - |q|) \tag{4.2}$$

L'équation semi-disrète avec le schéma spatial 'upstream' donne :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_i \left[U^+ T_{i-1/2} + U^- T_{i+1/2} \right] \right) \\ -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_j \left[V^+ T_{j-1/2} + V^- T_{j+1/2} \right] \right)$$

$$-\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_k \left[W^+ T_{k-1/2} + W^- T_{k+1/2} \right] \right)$$
(4.3)

En fait, on calcule dans un premier temps

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{n} = -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_{i} \left[U^{+n}T_{i-1/2}^{n-1} + U^{-n}T_{i+1/2}^{n-1}\right]\right) -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_{j} \left[V^{+n}T_{j-1/2}^{n-1} + V^{-n}T_{j+1/2}^{n-1}\right]\right) -\frac{1}{e_{1T}e_{2T}e_{3T}} \left(\delta_{k} \left[W^{+n}T_{k-1/2}^{n-1} + W^{-n}T_{k+1/2}^{n-1}\right]\right)$$
(4.4)

où l'indice n est l'indice temporel.

Puis on intègre temporellement ce premier Uptream par un schéma avant pour obtenir la solution intermédiaire :

$$T^{(1)} = T^{n-1} + \Delta t \left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_n \tag{4.5}$$

On calcule ensuite les flux de masse antidiffusif avec $T^{(1)}$:

$$U^{(1)} = \frac{1}{\overline{T}_{i+1/2}^{(1)}} \left(|U| - \Delta t * \frac{(U)^2}{e_{1u}e_{2u}e_{3u}} \right) * \delta_{i+\frac{1}{2}}[T^{(1)}]$$
(4.6)

De même pour $V^{(1)}$ et $W^{(1)}$.

Enfin, on fait un nouvel uptream en remplaçant U et T par $U^{(1)}$ et $T^{(1)}$.

Le schéma TVD de Zalesak

5.1 Principe de la méthode

Il est connu qu'un schéma dont l'ordre est supérieur à 1 provoque des oscillations, tout particulièrement dans les zones de discontinuité. Quant au schéma d'ordre inférieur, il ne produit pas d'oscillation mais diffuse excessivement. L'idée de Boris et Book [11] est de réunir les deux types de schéma. Ainsi, le flux est une moyenne pondérée par un limiteur de flux entre un flux calculé par un schéma d'ordre élevé et un flux calculé par un schéma d'ordre inférieur. On obtient ainsi une solution numérique précise et sans oscillation au niveau des discontinuités.

Cette méthode permet la construction d'une famille d'algorithmes capable de résoudre des problèmes avec des discontinuités de contact. Elles se distinguent par le choix du limiteur C. L'article de Zalesak [11] décrit l'algorithme suivant.

5.2 Discrétisation spatiale

L'algorithme suit les étapes suivantes :

1. Calcul de $F_{i+1/2}^L$ (l'indice L signifiant "Low order") à partir d'un schéma d'ordre peu élevé pour garantir la monotonie. Pour le modèle OPA, nous choisissons de prendre un schéma d'ordre 1 en espace, le schéma upstream :

$$F_{i+1/2}^L = F_{i+1/2}^{ups} \tag{5.1}$$

2. Calcul de $F_{i+1/2}^H$ (l'indice H signifiant "High order") à partir d'un schéma d'ordre supérieur. Pour le modèle OPA, nous choisissons de prendre un schéma d'ordre 2 en espace, le schéma d'Arakawa :

$$F_{i+1/2}^H = F_{i+1/2}^{a\,ra} \tag{5.2}$$

3. Définition du flux "antidiffusif" :

$$F_{i+1/2}^A = F_{i+1/2}^H - F_{i+1/2}^L$$
(5.3)

4. Calcul d'une solution intermédiaire d'ordre peu élevé par un schéma leapfrog :

$$T_i^{td} = T_i^{n-1} - 2\Delta t \ b_T^{-1} [F_{i+1/2}^L - F_{i-1/2}^L]$$
(5.4)

5. Calcul du limiteur de flux $C_{i+1/2}$:

On définit les quantités suivantes :

• $P_i^+ = max(0, F_{i-1/2}^A) - min(0, F_{i+1/2}^A)$ • $Q_i^+ = (T_i^{max} - T_i^{td})\frac{b_T}{2\Delta t}$ • $R_i^+ = \begin{cases} min(1, Q_i^+/P_i^+) & \text{si } P_i^+ > 0\\ 0 & \text{si } P_i^+ = 0 \end{cases}$

$$\begin{array}{l} \text{De même, on définit :} \\ \bullet \ P_i^- &= max(0, F_{i+1/2}^A) - min(0, F_{i-1/2}^A) \\ \bullet \ Q_i^- &= (T_i^{td} - T_i^{min}) \frac{b_T}{2\Delta t} \\ \bullet \ R_i^- &= \left\{ \begin{array}{c} min(1, Q_i^-/P_i^-) & \text{si } P_i^- > 0 \\ & 0 & \text{si } P_i^- = 0 \end{array} \right. \end{array}$$

avec T_i^{max} et T_i^{min} définis tels que :

$$\begin{array}{rcl}
T_{i}^{a} &=& max(T_{i}^{n-1},T_{i}^{td}) \\
T_{i}^{b} &=& min(T_{i}^{n-1},T_{i}^{td})
\end{array} (5.5)$$

$$T_i^{max} = max(T_{i-1}^a, T_i^a, T_{i+1}^a)
 T_i^{min} = min(T_{i-1}^b, T_i^b, T_{i+1}^b)
 (5.6)$$

Le limiteur $C_{i+1/2}$ est défini de la manière suivante :

$$C_{i+1/2} = \begin{cases} \min(R_{i+1}^+, R_i^-) & \text{si } F_{i+1/2}^A \ge 0\\ \min(R_i^+, R_{i+1}^-) & \text{si } F_{i+1/2}^A < 0 \end{cases}$$
(5.7)

6. Limitation des flux antidiffusifs :

Le flux limité est défini par :

$$F_{i+1/2}^{AC} = F_{i+1/2}^A C_{i+1/2} \quad 0 \le C_{i+1/2} \le 1$$
(5.8)

En jouant à la fois sur $F_{i+1/2}^{AC}$ et $F_{i-1/2}^{AC}$, on évite de dépasser les extréma T_i^{max} et T_i^{min} .

7. Application des flux antidiffusifs :

$$F_{i+1/2}^{tvd} = F_{i+1/2}^L + F_{i+1/2}^{AC}$$
(5.9)

Le schéma MUSCL

6.1 Principe de la méthode

Le remplacement d'un schéma d'ordre 1 par un schéma d'ordre plus élevé peut s'obtenir aisément en introduisant plus de points. Par exemple, un schéma centré (ordre 2) est plus précis qu'un schéma décentré (ordre 1).

La méthode de Godunov du 1er ordre se prête facilement à une extension à un ordre plus élevé. Van Leer [10] s'en est donc inspiré pour créer des schémas d'ordre plus élevé. Il a remplacé la fonction constante par morceaux par une fonction continue par morceaux à partir du polynôme de Legendre. Il obtient ainsi des ordres 2 ou 3 par extrapolation avec les cellules voisines. La méthode appartenant à la génération des schémas d'ordre 2 par extrapolation des variables, est communément appelé dans la littérature (voir les articles de Van Leer [10] et de F. Hourdin [5]), le schéma MUSCL (Monotone Upstreamcentered Schemes for Conservation Laws).

6.2 Discrétisation spatiale

Chaque dimension étant traitée indépendamment des deux autres, nous nous limiterons au cas 1D.

En raisonnant sur le volume d'une maille (Fig 6.1), on écrit que la variation de la quantité de traceur pendant la durée Δt , est égale à la quantité de traceur comprise dans le volume entrant dans la cellule moins la quantité de traceur comprise dans le volume sortant de la cellule.

Dans la cellule i, la valeur T du traceur est supposée variable dans la maille. Elle varie selon une droite de pente $\delta_i T$ et au point x, elle vaut :

$$T(x) = T_i + (x - x_i)\delta_i T$$

Le flux de matière qui sort de la cellule à travers la section i + 1/2 à la vitesse $u_{i+1/2}$ (surface hachurée Fig 6.2) vaut :







FIG. 6.2: Schéma MUSCL : le flux de matière

• si $u_{i+1/2} \ge 0$:

$$F_{i+1/2}^{mus} = U_{i+1/2} \frac{1}{2\Delta\hat{i}} (T_{i+1/2} + T_{i+1/2-\Delta\hat{i}})$$
(6.1)

où $\Delta \hat{i} = \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{e_{1u,i+1/2}}$ correspond au déplacement pendant le pas de temps Δt et $e_{1u,i+1/2}$ est le pas de discrétisation.

Ce qui peut aussi s'écrire sous la forme :

$$F_{i+1/2}^{mus} = U_{i+1/2}\tilde{T}_{i+1/2} \tag{6.2}$$

avec:

$$\tilde{T}_{i+1/2} = T_i + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{e_{1u,i+1/2}}\right) \delta_i T$$
(6.3)

• si $u_{i+1/2} < 0$:

$$F_{i+1/2}^{mus} = U_{i+1/2} \left(T_{i+1} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_{i+1/2} \Delta t}{e_{1u,i+1/2}} \right) \delta_{i+1} T \right)$$
(6.4)

Ce qui peut aussi s'écrire sous la forme :

$$F_{i+1/2}^{mus} = U_{i+1/2}\tilde{T}_{i+1/2} \tag{6.5}$$

avec :

$$\tilde{T}_{i+1/2} = T_{i+1} - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{e_{1u,i+1/2}} \right)$$
(6.6)

On remarque que \tilde{T} dépend du pas de temps Δt et de la vitesse car on fait un calcul exact de la quantité de matière sortante pendant Δt . Dans ses travaux de 1977 [10], Van Leer proposa une manière très simple d'assurer la monotonie. Elle consiste à limiter la pente de la droite en prenant toujours la plus petite des trois pentes (1), (2) ou (3) (Fig 6.3) calculées sur trois points différents : i-1, i et i+1. On dit que MUSCL est un schéma avec limiteur de pente.

• Dans les cas où $(T_{i-1} \leq T_i \leq T_{i+1})$ ou $(T_{i+1} \leq T_i \leq T_{i-1})$ alors :

$$\delta_i T = sign(T_{i+1} - T_{i-1})min(\frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2}, 2|T_{i+1} - T_i|, 2|T_i - T_{i-1}|)$$
(6.7)

• sinon si $(T_i > T_i \text{ et } T_i > T_{i-1})$ ou $(T_i < T_i \text{ et } T_i < T_{i-1})$ alors :

$$\delta_i T = 0 \tag{6.8}$$

Cette méthode permet ainsi de ne pas dépasser les extrémas.



FIG. 6.3: Schéma MUSCL : la monotonie



FIG. 6.4: Près d'une cellule masquée

6.3 Conditions limites

• près d'une cellule masquée :

Le problème des bords est un peu plus délicat à traiter que dans le cas des schémas précédents. En, effet, le calcul de la pente $\delta_i T$ si $u_{i+1/2} > 0$ au point i nécessite la valeur du traceur en trois points i - 1, i et i + 1 (d'après l'expression (6.5)). Si $u_{i+1/2} < 0$, les points sont i, i+1 et i+2 (voir Fig (6.4)). Pour cette raison, on est obligé de modifier l'expression (6.5) au voisinage des cellules masquées. On impose une pente nulle, ce qui revient à utiliser un schéma upstream.

• périodicité :

Si l'on souhaite étudier un cas périodique dans la direction i, on calcule le flux F^{mus} des points 2, jpi-2 et jpi-1 en fonction des points de la direction i suivants :

$$F^{mus} [2] = F^{mus} [jpi - 1, 2, 3, 4]$$

$$F^{mus} [jpi - 2] = F^{mus} [jpi - 3, jpi - 2, jpi - 1, 2]$$

$$F^{mus} [jpi - 1] = F^{mus} [jpi - 2, jpi - 1, 2, 3]$$

Le schéma PPM

7.1 Principe de la méthode

Le schéma PPM reprend la méthode de Godunov mais à un ordre plus élevé (ordre 3) comme l'a fait Van Leer [10] dans le schéma MUSCL. Son principal intérêt est l'introduction de paraboles comme fonctions d'interpolation. On obtient ainsi une représentation plus précise des gradients et des discontinuités. L'article de Colella et de Woodward [3] propose l'algorithme suivant.

7.2 Discrétisation spatiale

Le schéma est uniquement déterminé par le choix du polynôme d'interpolation. PPM utilise un polynôme continue par morceaux dans chaque zone :

$$T(x) = T_{L,i} + \frac{x - x_{i-1/2}}{e_{1T,i}} (\Delta T_i + T_{6,i} (1 - \frac{x - x_{i-1/2}}{e_{1T,i}}))$$
(7.1)

où l'abscisse x est tel que $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$. $T_{L,i}$ est la valeur extrapolée du traceur T_i au point i-1/2 et $T_{R,i}$ est sa valeur au point i+1/2. Dans la suite de ce chapitre, nous poserons $\Delta x_i = e_{1T,i}$.

Les termes ΔT_i et $T_{6,i}$ sont définis de la manière suivante :

$$\Delta T_i = T_{R,i} - T_{L,i} \text{ et } T_{6,i} = 6(T_i - \frac{1}{2}(T_{R,i} + T_{L,i}))$$
(7.2)

L'approximation du traceur T au point i+1/2, $\tilde{T}^{ppm}_{i+1/2},$ par la méthode de PPM vaut alors :

$$\tilde{T}_{i+1/2}^{ppm} = T_{R,i} - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{2\Delta x_i} (\Delta T_i - (1 - \frac{2}{3} \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{\Delta x_i}) T_{6,i}) \text{ si } u_{i+1/2} \ge 0 (7.3)$$

$$= T_{L,i} - \frac{u_{i+1/2}\Delta t}{2\Delta x_i} (\Delta T_{i+1} + (1 + \frac{2}{3}\frac{u_{i+1/2}\Delta t}{\Delta x_i})T_{6,i+1}) \text{ si } u_{i+1/2} < 0$$

• Calcul de $T_{R,i}$ et de $T_{L,i}$:

La valeur de $T_{R,i}$ (équation 7.4) est une moyenne pondérée par la variable η_i (équation 7.9) entre une approximation $T_{i+1/2}$ du traceur T au point i + 1/2 par le schéma d'interpolation donnée par l'équation (7.6) et une autre approximation du traceur T au point i + 1/2 par interpolation linéaire par morceaux (avec la pente δT_i). De même. on calcule $T_{L,i}$ au point i - 1/2 (équation 7.5).

$$T_{R,i} = T_{i+1/2}(1 - \eta_i) + (T_{i+1} - \frac{1}{2}\delta T_{i+1})\eta_i$$
(7.4)

$$T_{L,i} = T_{i-1/2}(1 - \eta_i) + (T_{i-1} + \frac{1}{2}\delta T_{i-1})\eta_i$$
(7.5)

• Calcul de $T_{i+1/2}$:

$$T_{i+1/2} = T_i + \frac{\Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} (T_{i+1} - T_i) + \frac{1}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i+2}}$$

$$\left[\frac{2\Delta x_{i+1}\Delta x_i}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \left[\frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} - \frac{\Delta x_{i+2} + \Delta x_{i+1}}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}\right] (T_{i+1} - T_i) - \Delta x_i \frac{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \delta T_{i+1} + \Delta x_{i+1} \frac{\Delta x_{i+2} + \Delta x_{i+1}}{2\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \delta T_i \right] (7.6)$$

où δT_i est défini par le principe de continuité suivant :

afin que $T_{i+1/2}$ appartienne à l'intervalle $[T_i, T_{i+1}]$, on choisit de prendre la pente la plus faible (voir le schéma MUSCL) :

• Dans les cas où $(T_{i-1} \leq T_i \leq T_{i+1})$ ou $(T_{i+1} \leq T_i \leq T_{i-1})$ alors :

$$\delta T_i = sign(T_{i+1} - T_{i-1})min(\delta_m T_i, 2|T_{i+1} - T_i|, 2|T_i - T_{i-1}|) \quad (7.7)$$

• sinon si $(T_i > T_i \text{ et } T_i > T_{i-1})$ ou $(T_i < T_i \text{ et } T_i < T_{i-1})$ alors :

$$\delta T_i = 0 \tag{7.8}$$

où $\delta_m T_i$ vaut :

$$\delta_m T_i = \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left[\frac{2\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} (T_{i+1} - T_i) + \frac{2\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} (T_i - T_{i-1}) \right]$$
(7.9)

• Calcul de η_i :

La variable η_i permet de traiter les discontinuités locales. Elle est défini par :

$$\eta_i = max(0, min(\eta^1(\tilde{\eta}_i - \eta^2), 1)$$
(7.10)

оù

Si $-\delta^2 T_{i+1} \cdot \delta^2 T_{i-1}, |T_{i+1} - T_{i-1}| - \varepsilon min(|T_{i+1}|, |T_{i-1}|) > 0$ alors :

$$\tilde{\eta}_i = -\left(\frac{\delta^2 T_{i+1} - \delta^2 T_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}\right) \left(\frac{(x_i - x_{i-1})^3 + (x_{i+1} - x_i)^3}{T_{i+1} - T_{i-1}}\right)$$
(7.11)

Sinon, $\tilde{\eta}_i = 0$. et où

$$\delta^2 T_i = \frac{1}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left[\frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} - \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}} \right] (7.12)$$

 η^1 , η^2 et ε sont des constantes dépendantes du problème traité. L'expérience montre que la recherche de ces constantes est délicate. Cependant, on peut noter l'importance de η^1 dans le calcul de η_i .

La variable η_i est un nombre sans dimension qui varie entre 0 et 1. La valeur 0 signifie qu'il n'y a pas de discontinuité et la valeur 1, qu'il y en a une.

• Extremum local et monotonie de la parabole :

Si T_i est un maximum ou un minimum local, alors on approxime le traceur T au point i + 1/2 par le schéma Upstream. $\tilde{T}_{i+1/2}$ est une constante et vaut T_i .

Si T_i se situe bien entre $T_{R,i}$ et $T_{L,i}$ mais, est tellement proche d'une des deux valeurs que le polynôme d'interpolation prend une valeur $\tilde{T}_{i+1/2}$ qui n'est pas entre $T_{R,i}$ et $T_{L,i}$, alors on modifie $T_{R,i}$ ou $T_{L,i}$ afin que la



FIG. 7.1: Près d'une cellule masquée

parabole soit monotone. La condition sur les coefficients de la parabole est $|\Delta T_i| \ge |\Delta T_{6,i}|$.

- Ces trois cas se traitent de la manière suivante :
 - 1. Si $(T_{R,i} T_i)(T_i T_{L,i}) \leq 0$ alors $T_{L,i}$ et $T_{R,i}$ prennent la valeur T_i .
 - 2. Si $(T_{R,i} T_{L,i})(T_i \frac{1}{2}(T_{R,i} + T_{L,i})) > \frac{(T_{R,i} T_{L,i})^2}{6}$ alors $T_{L,i}$ vaudra $3T_i 2T_{R,i}$
 - 3. Et si $-\frac{(T_{R,i}-T_{L,i})^2}{6} > (T_{R,i}-T_{L,i})(T_i-\frac{1}{2}(T_{R,i}+T_{L,i}))$ alors $T_{R,i}$ vaudra $3T_i 2T_{L,i}$.

7.3 Conditions limites

• près d'une cellule masquée :

PPM utilise beaucoup plus de points que MUSCL. En effet, le calcul du coefficient η_i si $u_{i+1/2} > 0$ au point i nécessite la valeur du traceur en cinq points i-2, i-1, i, i+1 et i+2 (d'après les expressions 7.10 et 7.11). Si $u_{i+1/2} < 0$, les points sont i-1, i, i+1, i+2 et i+3. Pour cette raison, on est obligé de modifier le calcul de \tilde{T}_i au voisinage des cellules masquées. On utilise un schéma upstream pour les flux des points i-1 et i-2 ou i+1 et i+2(Fig 7.1).

• périodicité :

Si l'on souhaite étudier un cas périodique dans la direction i, on calcule le flux F^{ppm} des points 2,3, jpi-3,jpi-2 et jpi-1 en fonction des points de la direction i suivants :

$$F^{ppm}[2] = F^{ppm}[jpi-2, jpi-1, 2, 3, 4, 5]$$

$$F^{ppm} [3] = F^{ppm} [jpi - 1, 2, 3, 4, 5, 6]$$

$$F^{ppm} [jpi - 3] = F^{ppm} [jpi - 5, jpi - 4, jpi - 3, jpi - 2, jpi - 1]$$

$$F^{ppm} [jpi - 2] = F^{ppm} [jpi - 4, jpi - 3, jpi - 2, jpi - 1, 2, 3]$$

$$F^{ppm} [jpi - 1] = F^{ppm} [jpi - 3, jpi - 2, jpi - 1, 2, 3, 4]$$

Le codage des schémas

- 8.1 Mise au point du codage des schémas sur un cas symétrique
- 8.1.1 présentation du cas



FIG. 8.1: Cas-test de débuggage

Afin de corriger le codage des schémas numériques, nous considérons deux cas simples 2D dont les caractéristiques sont les suivantes (Fig 8.1):

• un domaine de (jpi=52)x(jpj=52)x(jpk=51) points de grille

 \bullet le pas de discrétisation suivant x,
y et z est constant : $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1000 m$
- \bullet le pas de temps vaut $\Delta t = 360 s$
- le coefficient de stabilité vaut $CFL = \frac{u\Delta t}{\Delta x} = 0,144$ la fonction de courant ψ est indépendante du temps et vaut :

Pour le premier cas-test :

$$\psi(ji, jj) = 1.5 * \sin(\frac{\pi ji}{jpi - 2}) \sin(\frac{\pi jj}{jpj - 2})$$
(8.1)

on obtient un champ de vitesse (u, v) avec w = 0.

Pour le second cas-test :

$$\psi(ji, jk) = 1.5 * \sin(\frac{\pi ji}{jpi - 2}) \sin(\frac{\pi jk}{jpk - 1})$$
(8.2)

on obtient un champ de vitesse (u, w) avec v = 0.

où ji, jj et jk sont les indices.

• Initialisation du traceur passif :

Pour le premier cas-test :

$$T(ji, jj, jk) = 0.01 \exp\left(-0.01 \left((ji - 15)^2 + (jj - 26.5)^2\right)\right)$$
(8.3)

Pour le second cas-test :

$$T(ji, jj, jk) = 0.01 \exp\left(-0.01 \left((ji - 15)^2 + (jk - 25.5)^2\right)\right)$$
(8.4)

8.1.2Résultats

Le champ du traceur est entrainé par le champ de vitesse tournant. Au bout de 800 itérations, il atteint la position et la déformation suivantes (Fig 8.2).



FIG. 8.2: Schéma de Smolarkiewicz à deux phases correctives : champ initial du traceur et champ au bout de 800 itérations



FIG. 8.3: Différences d'orientation des axes horizontaux et verticaux dans OPA

Dans le code OPA, le codage n'est pas le même sur la direction z que sur les directions x et y (Fig 8.3), ce qui peut être une source d'erreurs. Ce test permet donc le débuggage du codage des schémas puisq'il a été conçu de manière à obtenir des résultats (résultats des cas (u,v) et (u,w)) qui soient identiques.

Cependant, il n'a pas permis d'identifier d'éventuels problèmes liés à la présence de masques, les domaines des tests ayant des frontières carrées.

8.2 Schéma PPM

Ce test a permis de débugguer les schémas TVD et MUSCL. Avec le codage actuel du schéma PPM dans le cas (u,v), on obtient la figure 8.4. Des oscillations apparaissent près des frontières et leur amplification provoque la divergence des résultats. On a essayé de supprimer ces instabilités de deux manières. D'après le schéma PPM, le traitement des discontinuités se fait grâce aux constantes η^1 , η^2 et ε que l'utilisateur doit fixer. Nous avons donc recherché dans un premier temps la meilleure combinaison possible des constantes. Nous n'avons ainsi réussi qu'à retarder l'apparition des instabilités, mais pas leur disparition. Puis, nous avons essayé de lisser ces oscillations en ajoutant de la diffusion horizontale laplacienne avec une constante K=42 (Annexe 1), mais ceci n'a pas permis non plus de les supprimer. Il semblerait donc que le codage des conditions limites près des cellules masquées présentent des erreurs ou bien, que leur choix soit à reconsidérer.

Dans le cas du test (u,w), on observe les mêmes instabilités mais, le champ est plus déformé. On pense donc qu'il existe des erreurs mathématiques dans le codage de la direction z du fait de la difficulté du schéma et de l'orientation de l'axe vertical (Fig 8.3) choisi par OPA. Afin de corriger ce code, une idée serait de changer la définition de la vitesse w et coder le schéma suivant la direction z de la même manière que les directions x et y.

Toutefois, le test 1D du chapitre suivant étant périodique et suivant la direction x, nous avons pu comparer ce schéma aux autres.



FIG. 8.4: Schéma PPM au bout de 100 (haut) et 150 itérations (bas)

Chapitre 9

Comparaison des schémas sur un cas test simple

9.1 Présentation du cas



FIG. 9.1: Cas test 1D

Afin de comparer les différents schémas numériques et de mettre en évidence les propriétés de chacun, nous considérons un cas simple 1D dont les caractéristiques sont les suivantes (Fig 9.1):

- un domaine de 151x51 points de grille
- le pas de discrétisation suivant x et y est constant : $\Delta x = \Delta y = 1000m$
- le pas de temps vaut $\Delta t = 360s$
- le coefficient de stabilité vaut $CFL = \frac{u\Delta t}{\Delta x} = 0,144$

• initialement, le traceur est nul partout sauf sur la zone $20 \le i \le 30$ et $20 \le j \le 30$ où il vaut 0.01

• le champ de vitesse est indépendant du temps et vaut :

$$u(y^*) = u_0 y^* (1 - y^*)$$

$$v = 0$$
(9.1)

où y^* est une variable adimensionnalisée et $u_0 = 1, 6 m/s$ une constante.

Schémas	Arakawa	Upstre	eam S	Smolarkiewic	z 1	
Cout CPU (en seconde)	5,6	6,9)	$11,\!8$		
Place Mémoire(Mwords)	5,9	6,1	-	6, 1		
Maximum du traceur	$1,\!2223$	0,77	49	$1,\!0682$		
Maximum des gradients de traceur	$0,\!3203$	0,08	62	$0,\!1668$		
Schémas	Smolarkie	olarkiewicz 2 TV		D MUSCL	PPM	
Cout CPU (en seconde)	16,6		11,4	10,9	14,5	
Place Mémoire(Mwords)	6,1		$5,\!9$	6,0	6,7	
Maximum du traceur	$1,\!1026$		$0,\!998$	0,9988	$0,\!9999$	
Maximum des gradients de traceur	$0,\!2188$		0,250	0,2523	0,6964	

9.2 Etude comparative des schémas

TAB. 9.1: Dans ce test, on ne calcule que l'advection du traceur, c'est un test off-line. Ce tableau regroupe les résultats obtenus au bout de 800 itérations. On notera que le maximum du traceur et le maximum des gradients de traceur données par la solution analytique valent 1.

Analyse du tableau 9.1 :

• temps CPU :

Les schémas Arakawa et Upstream sont peu coûteux en temps CPU. Les schémas Smolarkiewicz à une phase corrective, TVD et MUSCL ont un temps CPU similaire (deux fois plus élevé que celui des schémas Arakawa et Upstream), en revanche, Smolarkiewicz à deux phases correctives, et PPM sont plus coûteux (environ trois fois le temps du schéma d'Arakawa).

• place mémoire :

La place mémoire des schémas est en général du même ordre de grandeur excepté pour PPM qui en nécessite un peu plus.

• le maximum du traceur et le maximum des gradients du traceur :

Le schéma Upstream est le schéma qui conserve le moins bien le maximum et par conséquent, les gradients. Arakawa a tendance à surestimer le maximum. Enfin, Smolarkiewicz conserve nettement moins bien le maximum et les gradients que les schémas TVD,MUSCL et PPM. On peut noter que PPM est le schéma qui conserve le mieux le maximum du traceur (0,01 % d'erreur) et le maximum des gradients (son gradient vaut presque trois fois celui de MUSCL).

En regardant les figures suivantes, on constate que :

• schéma d'Arakawa :





FIG. 9.2: Variance des schémas numériques Arakawa et Smolarkiewicz





FIG. 9.3: Variance des schémas numériques TVD, MUSCL et PPM $\overset{42}{42}$



- - - - - - - - -

Arakawa

FIG. 9.4: Traceur : le schéma d'Arakawa. Les oscillations vers les abscisses i=140 s'expliquent par la périodivité



 ------ Smolarkiewicz 2

 __----- Smolarkiewicz 1

 ----- Upstream

FIG. 9.5: Traceur : le schéma de Smolarkiewicz $\overset{44}{44}$



MUSCL

TVD

Fig. 9.6: Traceur_45 TVD et MUSCL



____ · · · · _ _ _ · · · · · · · · ·

PPM

MUSCL

FIG. 9.7: Traceur : MUSCL et PPM 46

Sur la figure 9.4, on voit que le schéma ne conserve pas les extrémas puisqu'il oscille. Des valeurs négatives apparaissent. Malgré sa faible dissipation (liée essentiellement au filtre d'Asselin) (Fig 9.2) et son coût CPU peu élevé, Arakawa n'est pas adapté pour la résolution de l'équation de transport des traceurs passifs.

- schéma de Smolarkiewicz : Les schémas de Smolarkiewicz conservent la positivité, ils semblent donc plus appropriés pour étudier l'évolution d'un traceur passif. Sur le graphe 9.2, on peut voir que les phases correctives permettent de diminuer la diffusion. Le schéma à deux phases correctives est le moins diffusif, mais le plus coûteux en temps et en mémoire. On note enfin (Fig 9.5), que le maximum est mal conservé.
- schémas TVD et MUSCL : Les schémas TVD et MUSCL semblent aussi efficace l'un que l'autre (Tab 9.1) et dissipent de façon équivalente (Fig 9.3). TVD et MUSCL semblent donc aussi bien adaptés l'un que l'autre pour l'advection d'un front.
- schéma PPM :

C'est le schéma qui dissipe le moins (Fig 8.3) et qui conserve le mieux le maximum et les gradients. Cependant, il est couteûx en temps CPU et nécessite une grande place mémoire. De plus, ses résultats dépendent de la valeur des constantes que l'utilisateur doit fixer. Cette caractéristique en rend l'utilisation difficile.

Chapitre 10

Comparaison des schémas en 3D : un front périodique instable avec biologie

10.1 Présentation du cas-test

Le domaine étudié dans le cadre de cette étude est un canal zonal périodique de 168 km de large, sur 504 km de long et 4,3 km de profondeur.

Le domaine est discrétisé en mailles de 6 km de large, par 6 km de long (nous utiliserons dans les figures les résultats d'une autre expérience menée avec une résolution de 2km). Ce pas d'espace en largeur et en longueur est constant. Par contre le découpage en profondeur n'est pas régulier : les mailles vont de 10 à 300 m de profondeur. On a donc une grille de 28*84*30 points.

Les autres caractéristiques de ce test sont les suivantes :

- le pas de temps vaut $\Delta t = 360s$
- le nombre de pas de temps est 2400 itérations, soit une période de 10 jours.
- initialisation de la température : le champ de température présente un front (Fig 10.1) suivant la direction z vers 500 km dans la direction x.

10.2 Etude comparative des schémas

10.2.1 Résultats physiques

Le front de température est un état physique instable. Les particules d'eau chaude tendent à monter (courants ascendants) et les particules d'eau froide, à descendre (courants descendants) (Fig 10.3). Dans le plan hori-



FIG. 10.1: Champ initial de température

zontal, la signature de l'instabilité apparait sous la forme de méandres de température qui finissent par se détacher en tourbillons (Fig 10.2). Sur les graphes en annexe (Annexes 2, 3, 4 et 5), on constate que la concentration de nitrates augmente en moyenne avec la profondeur. A profondeur donnée (ici 91m), les concentrations de nitrates sont maximales dans les zones de vitesse ascendante (courant chaud). Inversement, on observe une faible concentration de phytoplancton au-dessous de la zone d'éclairement. Le phytoplancton se concentre essentiellement au-dessus de 150 mètres de profondeur avec une plus forte concentration dans la zone où la vitesse est ascendante. La forte concentration de nitrates et la présence de lumière sont les conditions idéales pour que le phytoplancton se développe (Fig 10.4).

10.2.2 Comparaison des schémas numériques

L'évolution du front avec biologie pendant 10 jours a été simulée avec les schémas suivants (on notera entre parenthèses les noms abrégés de ces simulations) utilisés avec ou sans diffusion horizontale bilaplacienne (Annexe 1) :

- Arakawa (ARA)
- Arakawa et diffusion horizontale bilaplacienne (ARA-DIF)
- Upstream (UP)
- Upstream et diffusion horizontale bilaplacienne (UP-DIF)
- Smolarkiewicz à une phase corrective (SM1)
- Smolarkiewicz à deux phases correctives (SM2)
- TVD (TVD)
- TVD et diffusion horizontale bilaplacienne (TVD-DIF)



FIG. 10.2: Champ de température et de vorticité au bout de 14 et 23 jours pour les expériences à 6km (en haut) et à 2km (en bas)



FIG. 10.3: Trajectoires moyennes des particules chaudes et des particules froides $% \left({{{\rm{T}}_{{\rm{FIG}}}} \right)$



FIG. 10.4: Courbes moyennes des traceurs en fonction de la profondeur (trait plein : expérience à 2km, trait pointillé : expérience à 6km)

- MUSCL (MUS)
- MUSCL et diffusion horizontale bilaplacienne (MUS-DIF)

Les schémas Smolarkiewicz avec de la diffusion horizontale bilaplacienne ne sont pas traités ici car ils divergent. L'essai avec le schéma PPM n'a pas été réalisé du fait de la non exactitude du codage.

$\operatorname{Sch\acute{e}mas}$	ARA-DIF	SM1	TVD-DIF	MUS	MUS-DIF
Cout CPU (en seconde)	1568	1245	2058	1258	1319
Place Mémoire(Mwords)	$13,\!3$	$15,\!8$	$14,\!1$	$17,\!9$	$17,\!9$
ndttrc $(1 \text{ ou } 2)$	1	2	1	2	2

TAB. 10.1: Tableau des caractéristiques des schémas pour le cas du front périodique instable avec biologie. Résultats obtenus au bout de 23 jours, soit 6000 itérations. ndttre est le facteur entre le pas de temps de la dynamique et le pas de temps des traceurs passifs. Lorsque ndttre vaut 2, l'équation d'évolution des traceurs est résolue deux fois moins souvent que lorsque ndttre vaut 1

Analyse du tableau 10.1 : • temps CPU :

SM1, MUS et MUS-DIF ont un coût CPU semblable. On note que le temps CPU d'ARA-DIF et de TVD-DIF est supérieur de 20 à 40% par rapport aux autres. Ceci s'explique par le fait que la résolution de l'équation de transport des traceurs passifs par les schémas d'Arakawa et TVD se fait deux fois plus souvent (ndttrc=1) que les autres schémas (ndttrc=2). On remarque enfin que l'ajout de diffusion augmente légèrement le temps CPU.

• place mémoire :

ARA est le schéma qui utilise le moins de mémoire, mais le coût des autres, à l'exception de MU, est seulement 20% supérieur à celui d'ARA.

Comparaison des schémas :

Dans cette simulation, on s'intéresse à la production de phytoplancton noté FNO3PHY. Les graphes Fig (10.5), Fig (10.6) et Fig (10.7) représentent la production moyenne sur le domaine .

• ARA, ARA-DIF, TVD et TVD-DIF :

Sur la figure (10.5), on constate que la production des deux schémas sont proches. L'ajout de diffusion dans les deux cas augmente la production de phytoplancton.

• UP, UP-DIF, SM1 et SM2 (Fig 10.6) :

La production de phytoplancton est deux fois plus importante que ARA-DIF dans le cas de SM2 et trois fois plus importante dans le cas de UP-DIF. On peut expliquer cet écart par la forte diffusion implicite verticale des schémas Upstream et Smolarkiewicz.

• MUS, MUS-DIF, TVD et TVD-DIF (Fig 10.7) :

La production de MUS vaut 1,5 fois la production d'ARA. De même, on constate que l'ajout de diffusion horizontale bilaplacienne augmente la production.

Pour expliquer ces courbes de productions, intéressons-nous aux graphes Fig 10.8, Fig 10.9 et Fig 10.10 représentant les champs de nitrates à 91 mètres



LEGENDE



FIG. 10.5: Production moyenne de phytoplancton : Arakawa et TVD



LEGENDE



FIG. 10.6: Production moyenne de phytoplancton : Smolarkiewicz



LEGENDE



FIG. 10.7: Production moyenne de phytoplancton : TVD et MUSCL



FIG. 10.8: Champ de NO3 à 91
m : Arakawa et TVD



FIG. 10.9: Champ de NO3 à $91\mathrm{m}$: Smolarkiewicz



FIG. 10.10: Champ de NO3 à 91
m : TVD et MUSCL



FIG. 10.11: Champ moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : Arakawa et TVD



FIG. 10.12: Champ moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : Smolarkiewicz



FIG. 10.13: Champ moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : TVD et MUSCL



FIG. 10.14: Champ de phytoplancton à $91\mathrm{m}$: Arakawa et TVD



FIG. 10.15: Champ de phytoplancton à $91\mathrm{m}$: Smolarkiewicz



FIG. 10.16: Champ de phytoplancton : TVD et MUSCL



FIG. 10.17: Champ de production moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : Arakawa et TVD



FIG. 10.18: Champ de production moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : Smolarkiewicz



FIG. 10.19: Champ de production moyen de phytoplancton entre 0 et 150m : TVD et MUSCL

et aux graphes Fig 10.17, Fig 10.18 et Fig 10.19 représentant la production moyenne de phytoplancton entre 0 et 150 mètres :

• ARA, ARA-DIF, TVD et TVD-DIF Fig 10.8):

Sur les graphes de la figure 10.8, on constate que les champs de nitrates d'ARA et TVD sont bruités. De plus, ARA aboutit à des valeurs négatives alors que TVD conserve la positivité. L'ajout de diffusion bilaplacienne pour lisser ces bruits provoque l'apparition de valeurs négatives dans les deux cas. De plus, on constate que les champs sont extrêmement semblables pour ARA-DIF et TVD-DIF.

Sur les graphes de la figure 10.17, les maxima de production de phytoplancton d'ARA sont trois fois plus élevés que les maxima d'ARA-DIF. Cependant, ils se concentrent sur des zones plus étroites. La production moyenne Fig 10.7 est donc plus forte avec de la diffusion horizontale.

• UP, UP-DIF, SM1 et SM2 (Fig 10.9 et Fig 10.18):

Sur la figure 10.9, les maxima du champ de nitrates avec UP-DIF sont deux fois plus élevés que ceux obtenus avec ARA-DIF. La production de phytoplancton est par conséquent plus forte (Fig 10.18 et Fig10.6).

• MUS, MUS-DIF, TVD et TVD-DIF (Fig 10.10 et Fig 10.19) : Sur la figure 10.10 :

Le champ MUS est très peu bruité (le champ est lisse) par rapport à TVD. Il est donc nécessaire de rajouter de la diffusion avec TVD, mais pas avec MUS. La figure 10.19 montre que les maxima de la production de phytoplancton de MUS sont inférieurs à ceux de TVD-DIF alors que les concentrations maximales de nitrate sont supérieures avec MUS. On peut supposer qu'il y a une plus forte décorrélation entre les zones de nitrates et de phytoplancton avec le schéma MUS qu'avec le schéma TVD+DIF.

Enfin, on remarque sur la figure 10.7 que la production de phytoplancton est plus importante chez MUS du fait des larges zones de valeurs non nulles (colorées en violet sur la figure 10.19) autour des tourbillons.

Résolution spatiale :

Enfin, un dernier essai a été réalisé avec ARA-DIF en améliorant la résolution spatiale. Nous prenons un pas de discrétisation de 2km. Sur la figure 10.20, la production de phytoplancton est aussi importante avec MUS à basse résolution (6km) que ARA-DIF avec une plus fine résolution (2km). Ce ré-


FIG. 10.20: Production moyenne de phytoplancton en basse (6km) et haute $(2\mathrm{km})$ résolution

sultat montre l'importance du choix du schéma numérique. La sensibilité des résultats au schéma est en effet du même ordre de grandeur (c'est-à-dire environ 50%) que la sensibilité des résultats à la résolution de la dynamique du problème (les vitesses étant plus intenses à 2km qu'à 6km (Fig 10.2)).

Conclusion

Actuellement, la représentation de forts gradients en océanographie tels que les fronts entre des masses d'eau différentes ou les côtes, est un véritable défi pour les numériciens. La traditionnelle technique de l'augmentation du nombre de point de grille dans le schéma numérique aboutit à une solution oscillante près des forts gradients (phénomène de Gibbs), solution n'ayant aucun sens physique. Ces oscillations peuvent être contrôlées en utilisant des schémas numériques dissipatifs tel que le schéma du premier ordre "Upstream" ou en imposant une viscosité artificielle pour lisser le bruit produit. Malheureusement, ces deux approches tendent à amortir considérablement la solution et par conséquent à ne pas reproduire fidèlement les forts gradients.

Afin d'améliorer la simulation des fronts, phénomène physique que l'on rencontre fréquemment en océanographie, de nouveaux schémas numériques ont été développés dans OPA-TRACEUR : le schéma TVD de Zalezak [11], le schéma MUSCL de Van Leer [10] et le schéma PPM [2]. Les schémas TVD et MUSCL ont des performances semblables. Ils sont conservatifs, monotones et surtout conservent nettement mieux les extrema que le schéma de Smolarkiewicz. De plus, ils ne sont que légèrement plus dissipatifs que le schéma d'arakawa. Cependant, le coût CPU de MUSCL est inférieur à celui de TVD. Dans le cas que nous avons étudié, MUSCL présentait en outre l'avantage de ne pas nécessiter le calcul supplémentaire d'une diffusion horizontale explicite. Les schémas TVD et MUSCL sont donc un atout pour l'étude des cycles biogéochimiques. Quant au schéma PPM, le test 1D périodique a montré ses étonnantes capacité à conserver les extrema et les gradients. Il serait donc intéressant de poursuivre son débuggage.

Bibliographie

- [1] Site du Lodyc : http://www.lodyc.jussieu.fr
- [2] Carpenter R. L.,Droegemeier K. K., Hane C. E.,1989, Application of the Piecewise Parabolic Method (PPM) to Meteorological Modeling, *Monthly Weather Review*, Vol. **118**, 586-612.
- [3] Colella P., Woodward P. R., 1984, The Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations, J. Comput. Phys., 54, 174-201.
- [4] Hecht M. W., Holland W. R., Rasch P. J., 1995, Upwind-weighted advection scheemes for ocean tracer transport : An evaluation in a passive tracer context, *Journal of geophysical Research*, Vol. 100, 20,763-20,778.
- [5] Hourdin F., 1998, The Use of Finite-Volume Methods for Atmospheric Advection of Trace Species. Part I : Test of Various Formulations in a General Circulation Model, *Monthly Weather Review*, Vol. 127, 822-837.
- [6] Lévy M., 1996, Modélisation des Processus Biogéochimiques en Mediterranée Nord-Occidentale Cycle Saisonnnier et Variabilité Mésoéchelle, Thèse
- [7] Madec G, Delecluse P., Imbard M., Lévy C., 1998, OPA8.1 ocean general circulation model reference manual.
- [8] Pietrzak J.,1996, The Use of TVD Limiters for Forward-in-Time Upstream-Based Advection Schemes in Ocean Modeling, *Monthly Wea*ther Review, Vol. 126, 812-830.
- [9] Smolarkiewicz, K. P. and T. L. Clark, 1986, The multidimensional positive definite advection transport algorithm : further development and applications, J. Comput. Phys., 67, 396-438.
- [10] Van Leer B., 1976, Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A New Approach to Numerical Convection, J. Comput. Phys., 23, 276-299.
- [11] Zalezak S. T., 1979, Fully Multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids, J. Comput. Phys., 31, 335-362.

ANNEXE 1 : Diffusion horizontale

Le schéma d'Arakawa et de Smolarkiewicz peuvent être utilisés, ou non, avec un terme de diffusion horizontale. Ici nous travaillons avec un opérateur bilaplacien.

On calcule tout d'abord le laplacien :

$$D_{i,j,k}^{n} = \frac{1}{e_{1T} * e_{2T}} \left(\delta_{i-1} \left[\frac{e_{2u}}{e_{1u}} \, \delta_i(T_{i,j,k}^n) \right] + \delta_{j-1} \left[\frac{e_{1v}}{e_{2v}} \, \delta_j(T_{i,j,k}^n) \right] \right) \tag{10.1}$$

on multiplie ensuite le résultat par un coefficient de diffusion B_h

$$D_{i,j,k}^{n} = D_{i,j,k}^{n} * B_{h}$$
(10.2)

On calcule enfin le bilaplacien :

$$D_{i,j,k}^{n} = \frac{1}{e_{1T} * e_{2T}} \left(\delta_{i-1} \left[\frac{e_{2u}}{e_{1u}} \, \delta_i(D_{i,j,k}^n) \right] + \delta_{j-1} \left[\frac{e_{1v}}{e_{2v}} \, \delta_j(D_{i,j,k}^n) \right] \right) \tag{10.3}$$

avec $e_{lT}=e_{lT_{i,j,k}}^n, l=1,2,3$

ANNEXE 2 : Arakawa avec diffusion horizontale bilaplacienne





FIG. 10.21: section verticale : Arakawa avec diffusion

ANNEXE 3 : Upstream avec diffusion horizontale bilaplacienne





FIG. 10.22: section verticale : Upstream avec diffusion

ANNEXE 4 : TVD avec diffusion horizontale bilaplacienne





FIG. 10.23: section verticale : TVD avec diffusion

ANNEXE 5 : MUSCL avec diffusion horizontale bilaplacienne





FIG. 10.24: section verticale : TVD avec diffusion