



Institut Pierre Simon Laplace

des Sciences de l'Environnement Global

Notes techniques du pôle de modélisation

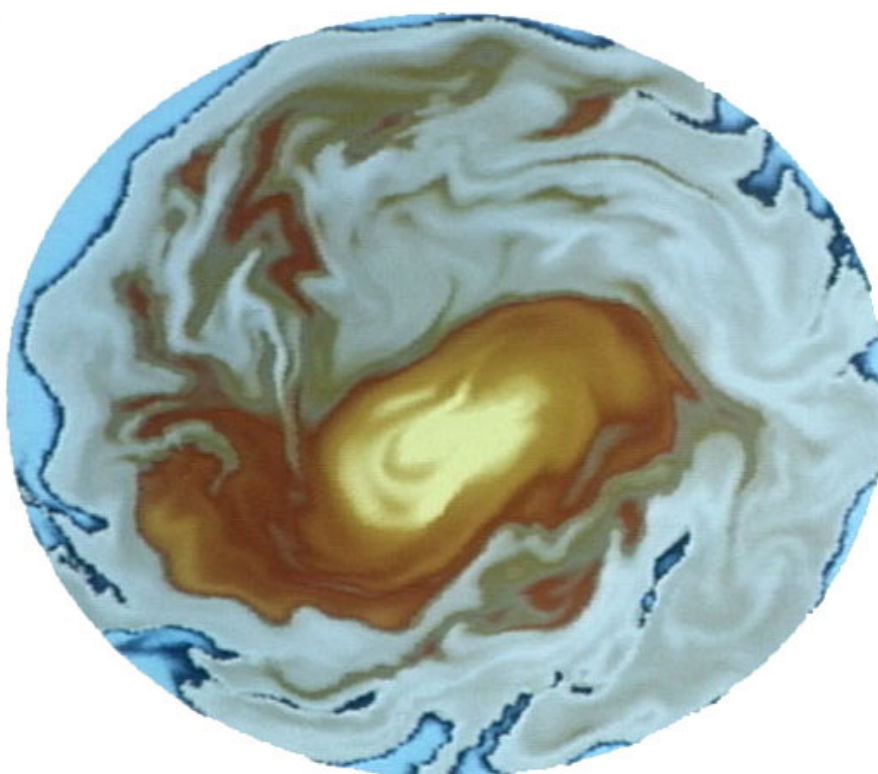
Tests de schémas numériques d'advection dans un modèle de circulation générale atmosphérique

David Le Croller^{*}, Marie-Angèle Filiberti^{*}, Frédéric Hourdin^{**}
et Line Jourdain^{***}

** Institut Pierre Simon Laplace, Paris, France*

*** Laboratoire de Météorologie Dynamique, Paris, France*

**** Service d'Aéronomie, Paris, France*



Avril - Septembre 2001

L'image de la page de garde représente les résultats d'une simulation numérique d'ozone. On voit nettement la zone de disparition dans la stratosphère arctique plus communément appelée trou d'ozone.

Table des matières

Remerciements	3
Introduction	5
Environnement de l'étude	9
I. Présentation de l'IPSL	9
II. Présentation du LMD	9
III. Le code LMDZ version 3.3	10
Les schémas d'advection aux volumes finis	13
I. Historique et origine	13
II. L'advection traitée par la méthode des volumes finis	13
II.1. <i>Présentation des principes de discrétisation</i>	13
II.2. <i>Description de quelques schémas</i>	14
Tests des schémas existant au LMD	21
I. Aperçu du coût des différents schémas	21
II. Présentation des cas tests 2D utilisés	21
II.1. <i>Un test de déformation : l'escargot</i>	21
II.2. <i>Un test de rotation pure : La rotation solide</i>	26
Tests du schéma PPM utilisé au GSFC	29
I. Présentation du schéma et de ses variantes	29
I.1. <i>La version Monotone de PPM</i>	29
I.2. <i>La version Semi-monotone de PPM</i>	30
I.3. <i>La version Définie Positive de PPM</i>	31
II. Etude du comportement du schéma sur des tests 1D	31
II.1. <i>Présentation des paramètres importants des tests</i>	31
II.2. <i>Dépouillement des résultats</i>	32
III. Etude du comportement du schéma sur des tests 2D	36
III.1. <i>Le cas test de l'escargot</i>	36
III.2. <i>Le cas test de la rotation solide</i>	39
Implantation du schéma PPM dans le GCM LMDZ.3.3	41
I. Les traceurs dans le GCM LMDZ.3.3	41
II. Les procédures d'interface entre le schéma ppm3D et le GCM	41
II.1. <i>Etude des arguments utilisés dans le programme ppm3D.F</i>	41
II.2. <i>Construction d'une interface d'entrée</i>	41
II.3. <i>Construction d'une interface de sortie</i>	42
II.4. <i>Traitement des pôles</i>	42
III. Changement d'architecture pour le GCM LMDZ.3.3	42
IV. Les problèmes liés au pas de temps dans l'advection	43
Les tests d'advection 3D : Radon ^{222}Rn et ozone O_3	45
I. Simulation de circulation d'un traceur passif : le radon ^{222}Rn	45

<i>I.1. Description du radon ^{222}Rn</i>	45
<i>I.2. Les simulations effectuées</i>	45
<i>I.3. Dépouillement des résultats</i>	46
II. Simulation d'advection d'un traceur actif : l'ozone O_3	53
<i>II.1. L'enjeu des simulations d'ozone</i>	53
<i>II.2. Description du module de chimie INCA</i>	53
<i>II.3. Les simulations effectuées</i>	55
<i>II.4. Dépouillement des résultats</i>	55
Conclusion	63
Liste des figures	65
Bibliographie	69
Annexes	71

Remerciements

A l'origine de ce stage de DEA, il y a avait un problème d'ordre général et toujours d'actualité : la modélisation numérique de l'advection. J'ai donc, pendant ce stage de 4 mois à l'Institut Pierre-Simon Laplace, collaboré avec de nombreuses personnes d'horizons différents : océanographes (LODYC), chimistes (SA) et climatologues (LMD et LSCE). Elles ont toutes été à l'écoute de mes problèmes et m'ont permis d'avancer dans les meilleures conditions.

Tout d'abord, je tiens à remercier Marie Angèle Filiberti et Frédéric Hourdin pour leur disponibilité, leurs conseils avisés et leur disponibilité tout au long de mon stage. Votre aide lors des longues recherches de « bugs » dans les programmes m'a été d'un grand secours. Je voudrais aussi dire merci à Line Jourdain, actuellement en thèse au Service d'Aéronomie, pour son aide précieuse dans les simulations 3D d'ozone et de Radon et leur interprétation. Enfin, l'ambiance n'aurait jamais été aussi bonne sans toute l'équipe de l'IPSL, un grand merci donc à, Cathy Boonne, Marie Alice Foujols, Viviane Leboucher, Mina Melloulchi, Catherine Senior, Susana Saniz-Trapaga et Wladimir Stzepourginski.

Introduction

L'étude de notre environnement planétaire, au cours des dernières décennies, a été marquée par l'apparition d'un outil de compréhension, d'analyse, et, dans certains cas, de prévision, entièrement nouveau : la modélisation numérique. C'est la disponibilité d'une puissance de calcul sans précédent, coïncidant avec l'apparition de moyens d'observation spatiale de la planète entièrement nouveaux, qui a permis cette émergence rapide. Les modèles numériques ont bénéficié à leur début de concepts scientifiques déjà établis, et dès les années 50, l'Eniac, premier ordinateur installé au MIT, était utilisé pour des applications météorologiques. Dans les années 1960, de vrais modèles globaux de la circulation générale de l'atmosphère étaient développés aux Etats Unis. En France les premiers modèles atmosphériques ont été développés au cours des années 70, au CNRS et à Météo-France. L'usage de ces modèles a dès le début été double : prévoir le temps à échéance de quelques jours, et comprendre les mécanismes fondamentaux qui régulent le climat de notre planète et ses variations à plus long terme. L'importance de la prévision météorologique explique en partie pourquoi les modèles océaniques, qui n'ont pas été poussés par un même besoin opérationnel, se sont développés avec quelques années de retard sur leurs cousins atmosphériques.

Le développement des modèles numériques s'est heurté à de nombreux problèmes qui ont occupé une large communauté scientifique. Les modèles de circulation générale de l'atmosphère ou de l'océan utilisent les équations de la mécanique des fluides pour calculer l'évolution des vents et des courants, dans l'atmosphère ou l'océan, à partir d'une situation initiale donnée. La composante atmosphérique, par exemple, calcule aux noeuds d'un maillage de quelques centaines de kilomètres, l'évolution, toutes les demi-heures environ, de paramètres tels que le vent, la température, l'humidité, les précipitations. Pour l'océan, la maille d'espace retenue est souvent plus petite que pour l'atmosphère, mais l'évolution est généralement calculée toutes les quelques minutes pour la dynamique et toutes les $\frac{1}{2}$ h pour la physique. Les équations sur lesquelles s'appuient ces calculs sont déjà anciennes, mais leur résolution pose encore des problèmes mal maîtrisés. En particulier, l'échelle spatiale du maillage est trop lâche pour retenir tous les processus qui ont une importance significative, et un grand nombre d'entre eux doivent être représentés de manière simplifiée, ou paramétrée. Ces simplifications nécessaires constituent à la fois une faiblesse des modèles et l'aliment d'une recherche active et multidisciplinaire. Outre les équations du mouvement, les échanges d'énergie, en particulier sous forme de rayonnement électromagnétique entre la terre, l'océan, l'atmosphère et l'espace, sont calculés de manière explicite par les modèles.

A l'heure actuelle, le niveau de réalisme des modèles est déjà suffisamment grand pour en faire des outils qui sont devenus indispensables à des tâches multiples. La prévision du temps, qui devient fiable à des échéances de plusieurs jours, en constitue l'exemple le plus connu. Mais le domaine de la climatologie, c'est-à-dire des évolutions plus lentes de notre environnement global, constitue lui aussi un champ d'application très riche des modèles. C'est au cours de la dernière décennie seulement que l'accroissement du temps de calcul disponible, qui a été multiplié par un facteur de plus de 100, a permis d'envisager les simulations pluriannuelles qui sont nécessaires pour les études de l'évolution climatique. En effet, si au bout de quelques jours, l'écoulement atmosphérique tend à devenir chaotique et imprévisible, son évolution à plus long terme est liée à des processus plus lents qui, eux, sont prévisibles. L'océan joue à ce niveau un rôle considérable. Ceci constitue une première motivation forte pour le développement de modèles couplés océan-atmosphère, qui simulent explicitement les circulations atmosphériques, océaniques, l'évolution de la banquise et les interactions de ces

différents milieux. En France ce travail, qui a abouti il y a environ 2 ans, a fait l'objet d'une coopération de plusieurs années entre des laboratoires et institutions variées : Insu/Cnrs, Météo-France, Cerfacs. Les fluctuations naturelles de notre environnement se manifestent aussi à des échelles de temps plus longues encore, de l'ordre de plusieurs millénaires, qu'il est important d'étudier si l'on veut comprendre le comportement des composantes les plus lentes du système climatique, telles que les grands glaciers continentaux ou la circulation océanique profonde.

Une autre motivation très forte qui pousse le développement des modèles climatiques est liée aux risques de plus en plus clairs que l'activité humaine fait peser sur notre environnement. La modification de la composition chimique de l'atmosphère, avec l'augmentation des gaz à effet de serre, ou celle des aérosols, pose un problème qui se situe aussi à l'échelle d'un ou plusieurs siècles : pour essayer de comprendre ce qui peut se passer, il faut pouvoir analyser ce qui s'est produit au cours du vingtième siècle, qui a vu l'apparition de ces formes de pollutions nouvelles, et tenter de l'extrapoler aux siècles futurs. L'utilisation des modèles climatiques reste dans ce cadre empreinte d'une marge d'incertitude qu'elle ne perdra peut-être jamais. Enfin, si tout porte à croire que l'effet de serre anthropique dominera l'évolution du climat au siècle prochain, la coexistence de facteurs variés (rôle refroidissant des aérosols, éruptions volcaniques, variations de l'insolation, fluctuations naturelles du système) rend encore très difficile toute estimation de la sensibilité du système climatique sur la base du léger réchauffement observé lors du siècle en cours. La réponse à moyen terme du système climatique peut aussi dépendre de processus encore mal compris. L'évolution de la composition de l'atmosphère constitue aussi un enjeu très important. Différentes équipes de recherche, en France - à l'IPSL ou à Météo-France - ou à l'étranger, travaillent déjà pour que dans un avenir proche les modèles associent l'atmosphère, l'océan et la glace, au travers de la totalité de leurs interactions physique, chimique et biologique. L'analyse des données recueillies par les instruments satellitaires, par bateau et par avion lors de campagnes de mesures, ou encore dans des stations au sol, est déjà, et sera de plus en plus indissociable du travail de développement des modèles. Néanmoins, du fait des incertitudes évoquées, du fait de la complexité des problèmes posés il est illusoire aujourd'hui de prétendre mener à bien une prévision précise de l'évolution future de notre environnement global. Les conditions d'applications des modèles peuvent évoluer cependant et si le climat commence à se modifier par exemple, leur capacité à extrapoler ce début d'évolution vers le futur se trouvera fortement augmentée. Dans tous les cas, les modèles constituent notre seul outil d'analyse et d'expertise face à ces problèmes environnementaux, et notre seule possibilité d'estimer un "risque climatique".

C'est dans cette volonté d'aboutir à une modélisation globale du climat que l'Institut Pierre Simon Laplace pour les sciences de l'environnement a été créé par le CNRS. En ce qui concerne la partie atmosphérique, c'est le modèle LMDZ.3.3 de circulation générale atmosphérique actuellement développé au LMD (Laboratoire de Météorologie Dynamique) qui est utilisé. Ce modèle ressemble beaucoup aux codes de prévision météorologique mais il sert à l'étude du climat et de sa variabilité. La modélisation des processus d'advection reste un point important dans la construction du code puisque l'advection intervient à la fois dans les équations de la dynamique du mouvement et dans la distribution des espèces traces. Il est donc important de les représenter avec précision dans un modèle numérique d'atmosphère. La récente prise en compte des gaz à effet de serre a renforcé cette nécessité puisqu'il a fallu représenter dans le modèle hydrodynamique, le transport advectif et diffusif d'un certain nombre d'espèces traces. Le code a été construit autour de méthodes aux volumes finis. Les schémas de transport présentent dans ce cas l'avantage d'être conservatifs par nature et de

pouvoir être rendu facilement monotones et positifs. Actuellement le code LMDZ.3.3 dispose d' 1 schéma numérique d'advection : Van Leer I (MUSCL). Pour les études troposphériques avec les grilles utilisées à l'heure actuelle (mailles d'environ 200 km sur l'horizontale et 2 km sur la verticale), ce schéma s'avère trop diffusif et incapable de représenter les forts contrastes verticaux en concentrations de certains constituants (ozone, vapeur d'eau) à la tropopause (vers 10 km d'altitude). Le code LMDZ.3.3 dispose également pour certaines applications très spécifiques du schéma de Prather qui s'avère très précis mais aussi trop gourmand en temps CPU. Le but du stage était donc de tester d'autres schémas d'advection qui pourraient représenter un compromis. Nous avons ainsi retenu plus spécialement 2 schémas : SLOPES et PPM (schémas moins diffusifs et pas trop coûteux en temps de calcul). Comme domaine d'application et de validation, nous nous sommes plus particulièrement intéressés à l'impact de la diffusion numérique sur la représentation des distributions d'ozone dans la troposphère.

Dans ce rapport, après une brève présentation de l'IPSL et du code de calcul atmosphérique LMDZ.3.3, nous décrirons l'équation mathématique d'advection et les problèmes de discrétisation qu'elle implique. Nous donnerons ensuite les procédures de construction de schémas d'advection aux volumes finis classiques dans le milieu de la météorologie : Godunov, Van Leer I (MUSCL), SLOPES, Prather. Nous introduirons ensuite le schéma PPM (*Piecewise Parabolic Method*) que nous présenterons plus en détails en vue de son adaptation dans le code LMDZ.3.3. Nous réaliserons ensuite une batterie de tests du 1D au 3D sur tous ces schémas afin de comparer leur précision, le temps de calcul nécessaire ainsi que l'influence de la résolution sur la qualité des résultats. Pour les tests 3D, nous réaliserons des simulations réalistes avec le code LMDZ.3.3 concernant l'advection d'un traceur passif : le radon, ainsi que celle d'un traceur actif : l'ozone.

Chapitre I

Environnement de l'étude.

I. 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 1^{er} 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 6 laboratoires de recherche :

- Le Centre d'Etudes des Environnements Terrestre et Planétaires (CETP)
- **Le Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD)**
- Le Laboratoire de Bio géochimie et de Chimie Marines (LBCM)
- 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)

II. Présentation du LMD

Fondé en 1968, le Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) comprend environ 150 membres repartis sur trois sites: l'École Polytechnique, l'École Normale Supérieure, et l'Université Pierre et Marie Curie. Le laboratoire a pour objet de rechercher les mécanismes, l'évolution et la prévision des phénomènes météorologiques et du climat.

Il est composé d'une direction, d'une équipe administrative, d'une équipe d'informaticiens, d'une documentaliste et de chercheurs, ingénieurs et techniciens ainsi que de doctorants et stagiaires collaborant dans les quatre domaines de recherche suivants:

- Activités de Modélisation :
 - du climat et des processus climatiques
 - de la variabilité climatique
 - de la pollution atmosphérique
 - des atmosphères planétaires
- Activités d'Analyse de mesures effectuées à partir de systèmes spatiaux :
 - Mesure du Bilan radiatif Terrestre
 - Analyse du rayonnement atmosphérique
 - Cycle de l'eau dans les Tropiques
- Activités expérimentales comprenant la mise au point d'instruments de mesure:
 - Télédétection par Lidar
 - Radiométrie satellitale
 - Mesures aéroportées et sous ballons
- Activités théoriques axées sur :
 - La dynamique des fluides géophysiques
 - La non-linéarité et la turbulence
 - L'assimilation des données

III. Le code LMDZ, version 3.3

L'outil de base pour l'étude de la dynamique du climat terrestre à l'IPSL est le modèle de circulation générale atmosphérique du LMD : LMDZ. Ce modèle tridimensionnel calcule l'évolution de l'atmosphère sous l'influence du rayonnement solaire et des échanges d'énergie avec la surface. Couplé avec des modèles d'océan, de sols, de couvert végétal et de glace de mer ou de chimie atmosphérique, le modèle permet de simuler le climat actuel, de reconstituer les climats passés sous l'influence des variations orbitales, et de prévoir l'impact climatique de divers scénarios : réchauffement par effet de serre, effet de la déforestation tropicale.

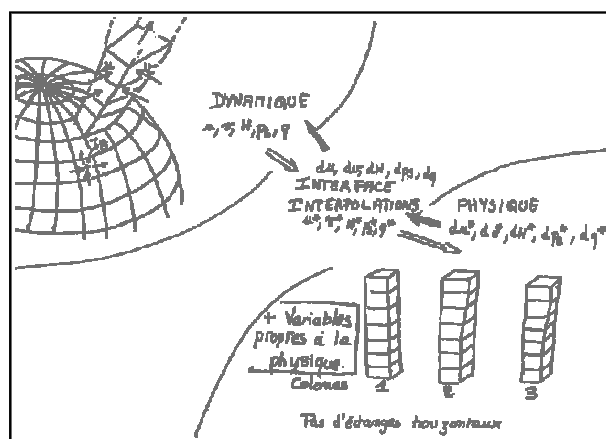
Le modèle de circulation générale effectue des calculs en chaque point d'un maillage 3D qui couvre l'ensemble de l'atmosphère. Des valeurs typiques de ce maillage sont par exemple 64x48x19 ou 96x72x19. Il s'agit du nombre de points en longitude, latitude et altitude. Pour la résolution 96x72x19, on obtient alors horizontalement des mailles de l'ordre de 400x280 kilomètres vers l'équateur.

La répartition des couches verticales est irrégulière, afin de permettre notamment une plus grande précision au niveau du sol. On décrit généralement à l'aide de 19 couches l'atmosphère jusqu'à une hauteur de l'ordre de 80 km. La première couche décrit alors les quelques premiers mètres au dessus du sol, tandis que les dernières décrivent plusieurs kilomètres.

Le modèle fonctionne en deux parties:

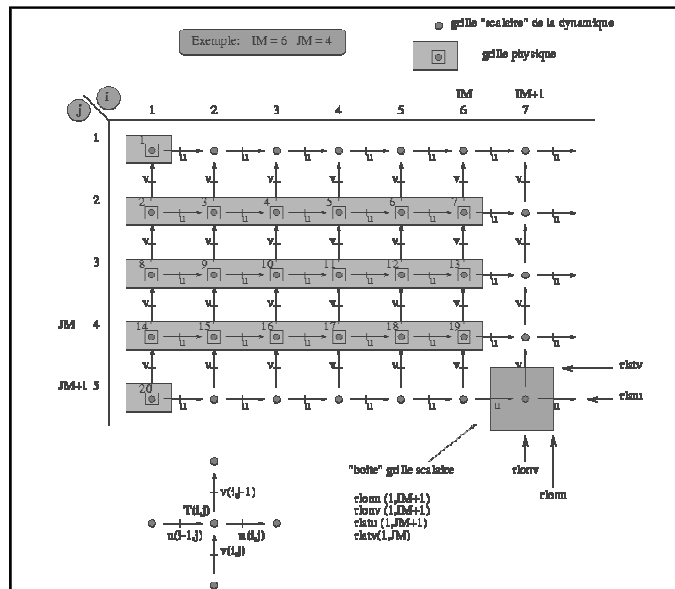
- D'une part la partie dynamique contenant la résolution numérique des équations générales de la circulation atmosphérique. Cette partie est commune au modèle terrestre et martien, et plus généralement à toutes les atmosphères de type terrestre.
- D'autre part la partie physique propre à la planète considérée.

Les calculs concernant la partie dynamique, sont réellement effectués sur une grille 3D avec des échanges horizontaux entre mailles, alors que la partie physique peut être vue comme une juxtaposition de colonnes d'atmosphère n'interagissant pas entre elles (schéma ci dessous).



On utilise pour chaque partie une grille différente. On a représenté sur la figure ci dessous la numérotation des grilles physiques et dynamiques ainsi que les positions des variables. Les variables scalaires (température potentielle, géopotentiel et pression de surface) sont évaluées aux points correspondant à des couples de valeurs entières $(X,Y)=(i,j)$. Les variables dynamiques sont décalées par rapport aux variables scalaires en utilisant une

grille C dans la définition de Arakawa : le vent zonal est calculé aux points $(X,Y)=(i+1/2,j)$ et le vent méridien aux points $(X,Y)=(i,j+1/2)$. Afin de repérer les coordonnées d'une variable (sur un point de grille, au dessus, en dessous, à droite, ou à gauche), on utilise les coordonnées rlonu, rlatu, rlonv et rlatv. On définit le nombre de points en longitude IM, le nombre de point en latitude JM. Pour la grille dynamique, on répète en $i=IM+1$ les valeurs de $i=1$ (périodicité en longitude). Les valeurs aux pôles sont quant à elles dupliquées $IM+1$ fois. En revanche, pour la grille physique, il n'y a qu'une valeur aux pôles et pas de périodicité en longitude.



Le modèle climatique du LMD est bâti, comme tous les modèles de circulation générale atmosphérique, sur la résolution numérique des équations primitives de la météorologie : l'équation de conservation de la quantité de mouvement, l'équation thermodynamique, l'équation hydrostatique et l'équation de continuité, décrites dans de nombreux ouvrages [4] .

La coordonnée verticale du modèle est la pression : $p(z) = A(z) + B(z)p_{sol}(x, y)$

C'est une coordonnée hybride, les fonctions A et B sont choisies telles que p soit une fonction de $p_{sol}(x,y)$ près du sol (coordonnées sigma) et une fonction de z en altitude.

On utilise dans le code les grandeurs suivantes : les composantes covariantes et contravariantes du vent, la pression extensive (pression au sol multipliée par l'aire de la maille), les trois composantes du flux de masse, le facteur de Coriolis multiplié par l'aire de la maille, la vorticité potentielle absolue et l'énergie cinétique. La discrétisation des équations se fait dans le code par différences finies mais la grille décalée (voir figure ci dessus) rappelle une grille de type *node centered* utilisée pour les volumes.

Chapitre II

Les schémas d'advection aux volumes finis

I. Historique et origine

La simulation numérique de l'advection d'espèces chimiques ou d'aérosols par les courants atmosphériques est devenue une tâche de plus en plus importante pour l'étude de la Terre ou même d'autres planètes du système solaire. Le problème majeur reste la discrétisation des équations de conservation de la masse. Un des premiers à s'être intéressé à la résolution numérique d'une loi de conservation a été S.K Godunov en 1959. Mais B. Van Leer en généralisant à un ordre supérieur les travaux de Godunov dans une série d'article parus en 1977 (voir [10] et [11]) a véritablement apporté beaucoup à la communauté des modélisateurs. Tous les schémas dont nous parlerons ici, bien qu'ils aient été repris et améliorés par d'autres scientifiques étaient déjà imaginée par Van Leer dès 1977. Que ce soit MUSCL, SLOPES, PPM ou Prather, ils découlent tous de la méthode de Godunov.

II. L'advection traitée par la méthode des volumes finis

A la place des points de grilles utilisés dans les schémas aux différences finies, on utilise en volume et éléments finis des boîtes. Le domaine entier est partagé en volumes élémentaires. Pour chaque volume, l'évolution de la concentration du traceur est évaluée par les flux aux interfaces du volume.

II.1 Présentation des principes de discrétisation

Les lois de conservation et de continuité décrivant l'advection d'une espèce sont :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho q \mathbf{v}) = 0 \quad (2)$$

La concentration du traceur, la masse volumique du fluide et le vecteur vitesse sont notés $q(\mathbf{x}, t)$, $\rho(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ dans les équations précédentes.

Les schémas aux volumes finis sont basés sur la forme intégrale de ces équations. Pour faciliter les calculs, nous allons raisonner en 2D ($q(\mathbf{x}, t)$ représente alors une masse surfacique). Définissons une cellule rectangulaire pour x compris dans $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$ et y dans $[y_{j-1/2}; y_{j+1/2}]$ de longueur Δx et de largeur Δy .

Donnons dès à présent les expressions intégrales de la masse d'air d'une cellule et de la masse de traceur d'une cellule pondérée par la masse d'air de la même cellule :

$$m_{ij} = \int \int_{\Delta x \Delta y} \rho dx dy \quad (3)$$

$$q_{ij} = \frac{\int \int_{\Delta x \Delta y} \rho q dx dy}{\int \int_{\Delta x \Delta y} \rho dx dy} \quad (4)$$

Intégrons ensuite les équations (1) et (2) sur une cellule et sur un intervalle de temps Δt , on obtient respectivement :

$$m_{ij}^{n+1} = m_{ij}^n - (U_{i+1/2,j} - U_{i-1/2,j}) - (U_{i,j+1/2} - U_{i,j-1/2}) \quad (5)$$

$$m_{ij}^{n+1} q_{ij}^{n+1} = m_{ij}^n q_{ij}^n - (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}) - (F_{i,j+1/2} - F_{i,j-1/2}) \quad (5 \text{ bis})$$

U est le flux de masse d'air et F le flux de masse de traceur moyenné sur les 4 interfaces de la cellule durant un intervalle de temps.

Par exemple on a :
$$U_{i+1/2,j} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \rho(x_{i+1/2}, y, t) u(x_{i+1/2}, y, t) dy dt \quad (6)$$

$$F_{i+1/2,j} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \rho(x_{i+1/2}, y, t) u(x_{i+1/2}, y, t) q(x_{i+1/2}, y, t) dy dt \quad (7)$$

Jusqu'ici aucune modélisation n'a été faite. D'après le théorème de la valeur moyenne appliquée à l'intégrale de $F_{i+1/2,j}$, il existe un point (α, β) dans $[x_{i+1/2} - u_{i+1/2} \Delta t / \Delta x; x_{i+1/2}]$ qui vérifie de manière exacte :

$$F_{i+1/2,j} = q(\alpha, \beta, t) \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{y_{i-1/2}}^{y_{i+1/2}} \rho(x_{i+1/2}, y, t) u(x_{i+1/2}, y, t) dy dt$$

Comme on ne sait pas où se situe ce point dans le segment, on l'approche par la valeur moyenne $\hat{q}_{i+1/2,j}$ de la portion de traceur advectée pendant un pas de temps. On obtient donc :

$$F_{i+1/2,j} \approx \hat{q}_{i+1/2,j} U_{i+1/2,j} \quad (8)$$

Le calcul du flux de masse d'air à chaque pas de temps, c'est à dire la résolution de l'équation (5), ne pose pas de problème. En effet, les valeurs des composantes du vent sont connues, à l'interface $(i+1/2, j)$ pour le vent zonal et $(i, j+1/2)$ pour le vent méridien. La masse volumique, quant à elle, peut être calculée en chaque point (i, j) en utilisant la formule des gaz parfaits. Il faut ensuite interpoler ces valeurs pour obtenir la masse volumique aux interfaces. Une fois toutes ces manipulations effectuées, on peut calculer les flux de masse d'air et résoudre l'équation (5). Par contre, pour obtenir les flux F il faut connaître $\hat{q}_{i+1/2,j}$. Tous les schémas numériques d'advection diffèrent par leur manière de calculer cette grandeur.

Ainsi, l'équation (5 bis) associée à une méthode d'approximation des flux F par l'intermédiaire de $\hat{q}$ à chaque interface définit un schéma d'advection aux volumes finis pour un traceur donné décrit par la quantité q .

II.2. Description de quelques schémas

Pour faciliter le raisonnement, nous décrirons les schémas en 1D. On peut ensuite étendre les résultats en 2D et 3D par la méthode de *flux splitting*. Cette méthode permet à un schéma multidimensionnel d'être construit à partir d'une méthode d'estimation des flux 1D. Chaque dimension est traitée séparément et séquentiellement. On traite ainsi pour un schéma 3D, l'advection suivant x ensuite on advecte les résultats suivant y puis z . Il peut exister des

cycles variants, ainsi dans le code LMDZ.3.3, le flux splitting s'opère comme suit : direction x puis y puis z puis x pour finir par y. Ajoutons une autre hypothèse simplificatrice, dans tout ce qui suit, nous supposons que toutes les cellules (ici réduites à des segments) ont les mêmes dimensions c'est à dire que Δx est constant. Ajoutons enfin que tous les schémas décrits seront d'ordre 1 en temps, c'est l'ordre en espace qu'on essaiera d'améliorer.

II.2.1. Les propriétés d'un schéma numérique d'advection

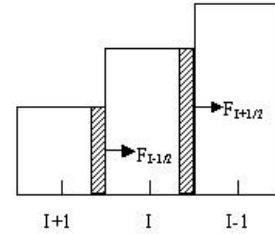
Un bon schéma d'advection doit respecter plusieurs règles. Il doit tout d'abord conserver exactement la masse totale de traceur, c'est le *principe de conservation*. Cette propriété est immédiatement vérifiée si l'on travaille en volume fini. Il doit ensuite garantir qu'un champ uniforme restera uniforme après advection sans se soucier de la compressibilité de l'écoulement, c'est le *principe de consistance*. De la même manière, il faut qu'il ne génère aucun nouveau extremum dans la concentration du traceur, c'est le *principe de monotonie* qui implique la *propriété de positivité*. Enfin, il doit être *stable* pour des pas de temps assez grand sous réserve que l'on ne dépasse pas le nombre de courant limite qui vaut généralement 1.

II.2.2. Le schéma de Godunov

La schéma de Godunov est le schéma d'advection de base, il est d'ordre 1 en espace [3]. Godunov estime les flux aux interfaces simplement comme suit :

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} U_{i+1/2} q_i^n & \text{si } U_{i+1/2} \geq 0 \\ U_{i+1/2} q_{i+1}^n & \text{autrement} \end{cases} \quad (9)$$

Ce schéma revient à considérer que la distribution du traceur dans une cellule est constante. Ce schéma est conservatif, positif, monotone mais très diffusif. Pour illustrer ce fait, discrétisons de manière décentrée amont en espace l'équation d'advection, on obtient alors :



$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{u_{i+1/2}}{\Delta x} (q_{i-1} - q_i)$$

Si l'on transforme le membre de droite, l'équation peut s'écrire de la manière suivante :

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = u_{i+1/2} \frac{q_{i-1} - q_{i+1}}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1/2}\Delta x}{2} \frac{q_{i-1} - 2q_i + q_{i+1}}{\Delta x^2}$$

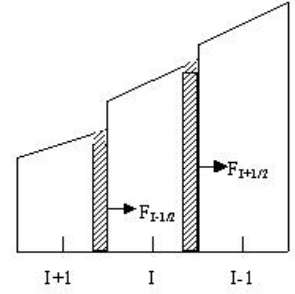
Le schéma de Godunov peut donc se voir comme la somme d'une discrétisation spatiale centrée (le 1^{er} terme du membre de droite) et d'un terme de diffusion (le 2^{ème} terme du membre de droite). C'est la présence inhérente de ce dernier terme qui engendre la très forte diffusivité du schéma et le rend inutilisable dans la pratique. Van Leer propose dès 1977 ([10] et [11]) d'étendre et d'améliorer cette méthode en construisant des polynômes de degré supérieur en sous maille.

II.2.3. Le schéma Van Leer I ou MUSCL

Van Leer reprend donc l'idée de Godunov mais remplace la fonction constante par morceaux par une fonction linéaire par morceaux. On obtient alors le schéma MUSCL également surnommé Van Leer I car ce fut le 1^{er} décrit dans l'article de Van Leer qui est d'ordre 2 en espace. Pour calculer les flux aux interfaces, on va donc supposer que la distribution du traceur dans une cellule $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$ obéit à :

$$q(x, t_n) = q_i^n + (x - x_i) \Delta_i^n \quad (10)$$

Il existe à priori plusieurs choix possibles pour construire la pente de la distribution dans la cellule i à l'instant n : choix centré, choix décentré amont, choix décentré aval. Cependant, dans ces travaux, Van Leer propose une manière très simple d'assurer la monotonie du schéma. Il s'appuie pour cela sur un choix judicieux du calcul de la pente et décide de limiter la valeur de celle-ci dans chacune des distributions sous maille. Il choisit donc toujours la plus petite des trois pentes possibles calculées sur les 3 points $i-1, i, i+1$. MUSCL ainsi adapté est un schéma dit à limiteur de pente :



- Dans le cas où $q_{i-1}^n \leq q_i^n \leq q_{i+1}^n$ ou $q_{i+1}^n \leq q_i^n \leq q_{i-1}^n$ alors :

$$\Delta_i^n = \text{sign}(q_{i+1}^n - q_{i-1}^n) \min \left(\frac{|q_{i+1}^n - q_{i-1}^n|}{2}, 2|q_{i+1}^n - q_i^n|, 2|q_i^n - q_{i-1}^n| \right) \quad (11)$$

- Sinon si q_i^n est un extremum local de la distribution alors :

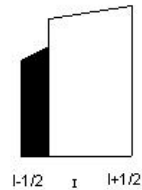
$$\Delta_i^n = 0 \quad (12)$$

La vitesse est toujours supposée constante sur toute l'interface. Ainsi on obtient les flux estimés par le schéma Van Leer I :

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} U_{i+1/2} \left(q_i^n + \frac{1}{2} \Delta_i^n \left(1 - u_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \right) & \text{si } u_{i+1/2} \geq 0 \\ U_{i+1/2} \left(q_{i+1}^n - \frac{1}{2} \Delta_{i+1}^n \left(1 + u_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \right) \right) & \text{autrement} \end{cases} \quad (13)$$

II.2.4. Le schéma SLOPES

Le calcul de la pente de la distribution dans une cellule donnée peut être effectué sans utiliser les différences finies. Dans le schéma SLOPES, on advecte le traceur sur un pas de temps ce qui revient dans le cas 1D à translater les distributions sur la distance $u\Delta t$ (u étant la vitesse



d'advection). Dans une cellule donnée, la concentration du traceur est alors représentée par une ligne brisée (voir le schéma ci dessus). On calcule la nouvelle pente de la distribution en minimisant le critère des moindres carrés. Ce critère consiste à minimiser la quantité :

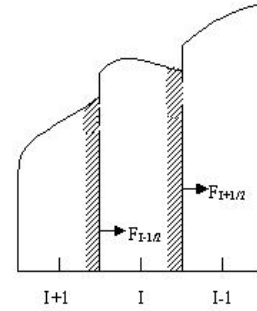
$$J(a_0, \dots, a_k) = \sum_{i=1}^N |f(a_0, \dots, a_k, x_i) - y_i|^2$$

Ce n'est en fait que l'un des critères possibles qui permet connaissant N couples de points (x_i, y_i) et une fonction $f(a_0, \dots, a_k, x)$ d'ajuster au mieux sur les données les $k+1$ paramètres a_i . Une condition nécessaire mais en général non suffisante pour que le critère soit minimum est que les dérivées de cette quantité par rapport à chacun des a_i s'annulent. On cherche donc à résoudre $k+1$ équations non linéaires en $k+1$ inconnues. Cette méthode présente l'avantage d'aboutir à la résolution d'un système linéaire lorsque la fonction f est un polynôme de degré k . Dans notre cas, on cherche des polynômes de degré 1 donc k vaut 1, le système est alors assez simple à résoudre. Ce schéma numérique d'advection est décrit en détails dans l'article de Russel et Lerner [9].

II.2.5. Le schéma PPM

Le schéma PPM (Piecewise Parabolic Method) reprend la méthode de Godunov mais à un ordre encore supérieur, puisque l'on atteint le 3^{ème} ordre en espace. Les fonctions d'interpolation de la distribution du traceur sont cette fois des paraboles. On obtient ainsi une représentation plus précise des gradients et des discontinuités. La méthode est décrite dans l'article de Collela et Woodward [12].

Nous allons donner ici les étapes de la construction du schéma PPM non contraint, nous discuterons plus tard des améliorations à lui apporter pour le rendre par exemple monotone ou positif défini.



Ce schéma est entièrement déterminé par le choix du polynôme d'interpolation. PPM utilise un polynôme du second degré :

$$q(x, t_n) = q_{L,i}^n + \frac{x - x_{i-1/2}}{\Delta x} \left(\Delta q_i^n + q_{6,i}^n \left(1 - \frac{x - x_{i-1/2}}{\Delta x} \right) \right) \quad (14)$$

L'abscisse x est comprise dans $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$. $q_{L,i}$ est la valeur extrapolée du traceur au point $i-1/2$ (L signifie Left) et $q_{R,i}$ est sa valeur au point $i+1/2$ (R signifie Right).

Les deux autres termes sont définis de la manière suivante :

$$\Delta q_i^n = q_{R,i}^n - q_{L,i}^n \quad \text{et} \quad q_{6,i}^n = 6 \left(q_i^n - \frac{1}{2} (q_{R,i}^n + q_{L,i}^n) \right) \quad (15)$$

Pour obtenir la valeur extrapolée à gauche pour la cellule $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$, considérons le polynôme P du 4^{ème} degré défini sur $[x_{i-5/2}; x_{i+3/2}]$ dont l'intégrale sur chaque maille vaut la valeur moyenne du traceur dans la maille considérée (par exemple l'intégrale de P sur $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$ vaut q_i). La détermination de ce polynôme nécessite la résolution d'un système à 4 inconnues. Pour cela, il nous faut 4 équations, c'est chose faite puisque l'on connaît la valeur

moyenne du traceur dans chacune des 4 mailles. Le coefficient constant de P est égal à la valeur $q_{L,i}$ cherchée.

On obtient donc à l'instant n :

$$q_{L,i} = \frac{1}{2}(q_{i-1} + q_i) - \frac{1}{6} \left(\frac{q_{i+1} - q_{i-1}}{2} - \frac{q_i - q_{i-2}}{2} \right) \quad (16)$$

On reconnaît dans le dernier terme du membre de droite le calcul de 2 pentes centrés pour les cellules $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$ et $[x_{i-3/2}; x_{i-1/2}]$. Afin d'être sûr que la valeur extrapolée $q_{L,i}$ du traceur à l'interface gauche de la maille i soit comprise entre q_i et q_{i-1} , on choisit de prendre la pente la plus faible comme dans le schéma MUSCL, on obtient alors toujours à l'instant n :

$$q_{L,i} = \frac{1}{2}(q_{i-1} + q_i) - \frac{1}{6}(\delta q_i - \delta q_{i-1}) \quad (17)$$

Lorsque l'on passe à la cellule suivante à droite $[x_{i+1/2}; x_{i+3/2}]$, la valeur $q_{L,i}$ devient la valeur $q_{R,i-1}$. Si l'on se fixe cette règle, on obtient la version non contrainte du schéma PPM dont la monotonie peut parfois être mise à défaut. Nous donnerons plus tard les raffinements à apporter à la méthode pour rendre le schéma monotone ou par exemple positif défini (articles [7] et [13]).

A partir de là, on peut facilement calculer les flux aux interfaces, on obtient :

$$F_{i+1/2} = \begin{cases} U_{i+1/2} \left(q_{R,i}^n - \frac{u_{i+1/2} \Delta t}{2\Delta x} \left(\Delta q_i^n - \left(1 - \frac{2u_{i+1/2} \Delta t}{3\Delta x} \right) q_{6,i}^n \right) \right) & \text{si } u_{i+1/2} \geq 0 \\ U_{i+1/2} \left(q_{L,i+1}^n - \frac{u_{i+1/2} \Delta t}{2\Delta x} \left(\Delta q_{i+1}^n + \left(1 + \frac{2u_{i+1/2} \Delta t}{3\Delta x} \right) q_{6,i+1}^n \right) \right) & \text{si } u_{i+1/2} \leq 0 \end{cases} \quad (18)$$

Comme tous les schémas d'ordre élevé, on voit que PPM s'appuie sur un grand nombre de points voisins (4 dans ce cas précis). Or, près des frontières du domaine, on ne dispose pas d'autant d'informations. Un tel schéma n'est donc utilisable et efficace que loin des bords. Lorsque l'on se rapproche d'une frontière, on est obligé de se ramener à un schéma nécessitant moins d'informations, c'est à dire MUSCL où même Godunov dans certains cas.

II.2.6. Le schéma de Prather

Le schéma de Prather est également du 3^{ème} ordre en espace, il a été décrit dans l'article de Prather en 1986 [8]. La principale différence de ce schéma est qu'il modélise la distribution du traceur dans une maille par un polynôme du second degré à 3 dimensions :

$$f(x, y, z) = a_0 + a_x x + a_{xx} x^2 + a_y y + a_{yy} y^2 + a_z z + a_{zz} z^2 + a_{xy} xy + a_{yz} yz + a_{xz} xz$$

Dans tous les autres schémas, on raisonnait successivement dans chacune des directions avec une distribution sur une grille 1D et un vent lui aussi 1D puis l'on passait à une grille 3D et un vent 3D par flux splitting. Pour le schéma de Prather, la distribution est

directement modélisée sur une grille 3D mais avec toujours un écoulement 1D. L'opération de flux splitting s'effectue donc toujours pour passer à une advection avec des vents 3D.

Supposons que l'advection s'effectue suivant x et que la distribution f dans chacune des cellules à l'instant t est connue. En résumé, la procédure consiste alors à calculer le moment d'ordre 0 (quantité totale de traceur), les moments d'ordre 1 (3 moments en 3D), les moments d'ordre 2 (6 moments en 3D) de la distribution dans chaque cellule. A partir de ces moments connus pour la cellule entière, on calcule les moments associés à la parcelle d'air qui est sortie de chaque cellule pendant le pas de temps d'advection. Puis on combine ces moments avec ceux de la cellule entière adjacente (celle à droite si l'écoulement arrive de la gauche) calculés auparavant. On obtient alors les nouveaux moments pour chacune des cellule et donc la nouvelle distribution polynomiale f pour l'instant $t+dt$.

On voit tout de suite que la quantité d'informations que l'on stocke et que l'on transporte à chaque pas de temps sur la distribution de sous maille est beaucoup plus importante que pour les autres schémas (10 variables en 3D). On s'attend donc avec cette méthode à obtenir des résultats très précis mais aussi des temps de calcul certainement longs.

Remarque : Nous n'avons considéré ici que des schémas modélisant la distribution de sous maille par des fonctions polynomiales. Leur gros avantage est d'être facile à intégrer pour calculer les flux de masse. Néanmoins, d'autres pistes pourraient être exploitées en choisissant d'autres fonctions. Pour plus de détails sur ce sujet, le lecteur se reportera à l'article [10].

Chapitre III

Tests des schémas existants au LMD : Godunov, MUSCL, SLOPES, Prather

I. Aperçu du coût des différents schémas

Il est fondamental de connaître l'importance du temps de calcul pour chaque schéma d'advection. Ce problème est crucial puisque notre but est de réaliser des simulations climatiques 3D qui sont coûteuses en mémoire et en temps de calcul.

Comparons donc ces différents schémas en terme de stockage pour une utilisation 3D. Godunov, MUSCL nécessite le stockage d'une seule valeur par maille (la valeur moyenne du traceur). Le schéma SLOPES oblige de stocker en plus de cette valeur moyenne, les 3 moments du 1^{er} ordre, ce qui fait en tout 4 valeurs. Prather est encore plus coûteux puisqu'il oblige à conserver également les 3 moments du 2^{ème} ordre ainsi que 3 dérivées croisées, on aboutit donc à 10 variables par maille.

Parlons ici rapidement des différents types de machines qui seront utilisées par la suite : les machines scalaires (type station SUN Ultra) et les machines vectorielles (type CRAY-90 ou NEC SX5). Les machines scalaires sont spécialisées dans les opérations arithmétiques. Les machines vectorielles, elles, effectuent des opérations sur des vecteurs. Elles manipulent beaucoup de données, mais des données très récurrentes. Ce type de machine présente donc un avantage certain lorsque l'on manipule des boucles de grandes dimensions, c'est à dire des résolutions élevées. Ceci peut, le cas échéant, favoriser un schéma d'ordre faible (peu coûteux en temps de calcul) mais à forte résolution. Nous en reparlerons plus tard, mais à titre d'exemple, dans l'article [5], nous avons trouvé des temps de calculs sur CRAY-90 similaires pour une configuration SLOPES-60x43 et MUSCL-120x85.

II. Présentation des cas tests 2D utilisés et résultats

Nous allons présenter ici les cas tests utilisés pour valider et comparer les schémas de Van Leer I (MUSCL), SLOPES, Prather. En effet Godunov nous paraît vraiment trop diffusif pour pouvoir représenter une alternative satisfaisante. De plus, la diffusion est comme nous l'avons déjà expliqué indépendante du champ de traceur. Pour le schéma MUSCL, nous avons utilisé un limiteur de pente afin de rendre le schéma monotone et positif. Pour les schémas de Russel (SLOPES) et Prather, on a juste garanti la positivité grâce à des limiteurs de flux.

De nombreux tests divers et variés existent dans la littérature des schémas d'advection, nous n'avons quant à nous retenu que deux tests bidimensionnels qui éprouvent chacun une propriété bien spécifique. Nous réaliserons ainsi un test de déformation (l'escargot) et un test de rotation pure (la rotation solide).

II.1. Un test de déformation : l'escargot

II.1.1 Explications analytiques du test

Nous présentons d'abord un test d'advection horizontal avec un champ de vent analytique simple sur la sphère pour lequel l'advection peut être déterminée exactement. Nous nous plaçons en coordonnées sphériques, l'écoulement est supposé bi-dimensionnel et à

divergence nulle. Nous avons alors l'équation liant les coordonnées longitude latitude (λ, ϕ) et les composantes zonale (u) et méridienne (v) du vent :

$$\frac{\partial u}{\partial \lambda} + \frac{\partial v \cos(\phi)}{\partial \phi} = 0 \quad (19)$$

Le champ de vent analytique utilisé pour l'advection dérive du potentiel suivant où a est le rayon de la Terre et U_0 est une vitesse normalisée:

$$\psi = aU_0 \cos^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) \cos^2(\phi) \quad (20)$$

On en déduit alors les composantes du vent :

$$u = \frac{-1}{a} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = 2U_0 \cos^2\left(\frac{\lambda}{2}\right) \cos(\phi) \sin(\phi) \quad (21)$$

$$v = \frac{1}{a \cos(\phi)} \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} = -U_0 \cos\left(\frac{\lambda}{2}\right) \sin\left(\frac{\lambda}{2}\right) \cos(\phi) \quad (22)$$

On suit maintenant une trajectoire c'est à dire une courbe iso- ψ . La vitesse méridienne v peut s'écrire en éliminant ϕ dans (22) grâce à (20) :

$$v = -\text{sign}(\lambda) \sqrt{\frac{\psi U_0}{a} \left(1 - \cos^2\left(\frac{\lambda}{2}\right)\right)} \quad (23)$$

On introduit le paramètre $\alpha = \sqrt{\frac{\psi U_0}{a^3}}$ ce qui permet en intégrant $v = a \frac{d\phi}{dt}$ d'obtenir :

$$-\alpha \int \text{sign}(\lambda) dt = \int \frac{\cos(\phi) d\phi}{\left(\cos^2(\phi) - \frac{\psi}{aU_0}\right)^{1/2}} \quad (24)$$

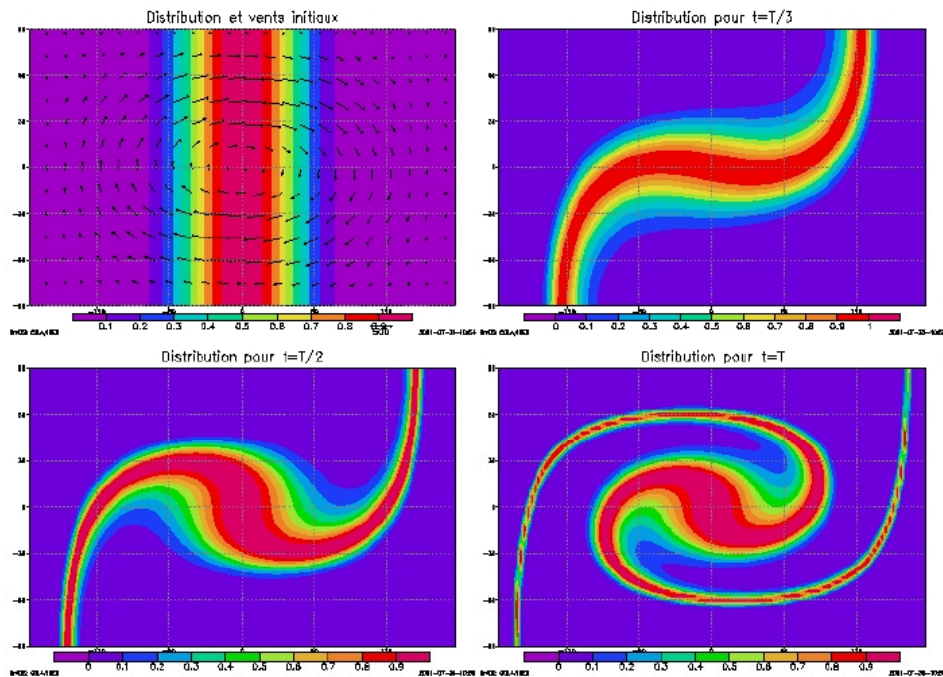
Le membre de droite s'intègre directement en :

$$\left[\arcsin \left(\frac{\sin(\phi)}{\left(1 - \frac{\psi}{aU_0}\right)^{1/2}} \right) \right] \quad (25)$$

On obtient ainsi la loi horaire du mouvement. Le temps mis par une particule d'air pour revenir à sa position initiale vaut :

$$\frac{2\pi}{\alpha} = \frac{2\pi a}{U_0 \cos(\phi) \sin\left(\frac{\lambda}{2}\right)} \quad (26)$$

On remarque que cette période est minimum au centre du domaine et infinie aux frontières. L'air tourne donc plus rapidement près du centre ce qui génère une spirale. Pour les tests numériques, nous avons pris une distribution initiale gaussienne indépendante de la latitude. Le lecteur trouvera ci-dessous l'évolution dans le temps du champ du traceur, on voit bien pourquoi l'on surnomme ce cas test l'escargot.



Ces tests ont été effectués sur la sphère avec donc les contraintes liées au traitement des 2 pôles. A ces endroits, on voit que le vent est uniquement zonal, la distribution est donc uniquement translatée. Les résultats sont ensuite projeté sur la planisphère par défaut du logiciel Grads.

Ce cas test doit permettre de tirer plusieurs conclusions. Tout d'abord nous pourrons comparer les performances des différents schémas pour une résolution donnée puisque la solution exacte est connue. De plus nous quantifierons l'impact de la résolution sur les différents schémas en considérant les résolutions : $40 \times 21 \times 1$, $60 \times 31 \times 1$, $120 \times 61 \times 1$ (le 1^{er} chiffre correspondant au nombre de points en longitude, le 2^{ème} au nombre de points en latitude et le 3^{ème} au nombre de points sur la verticale).

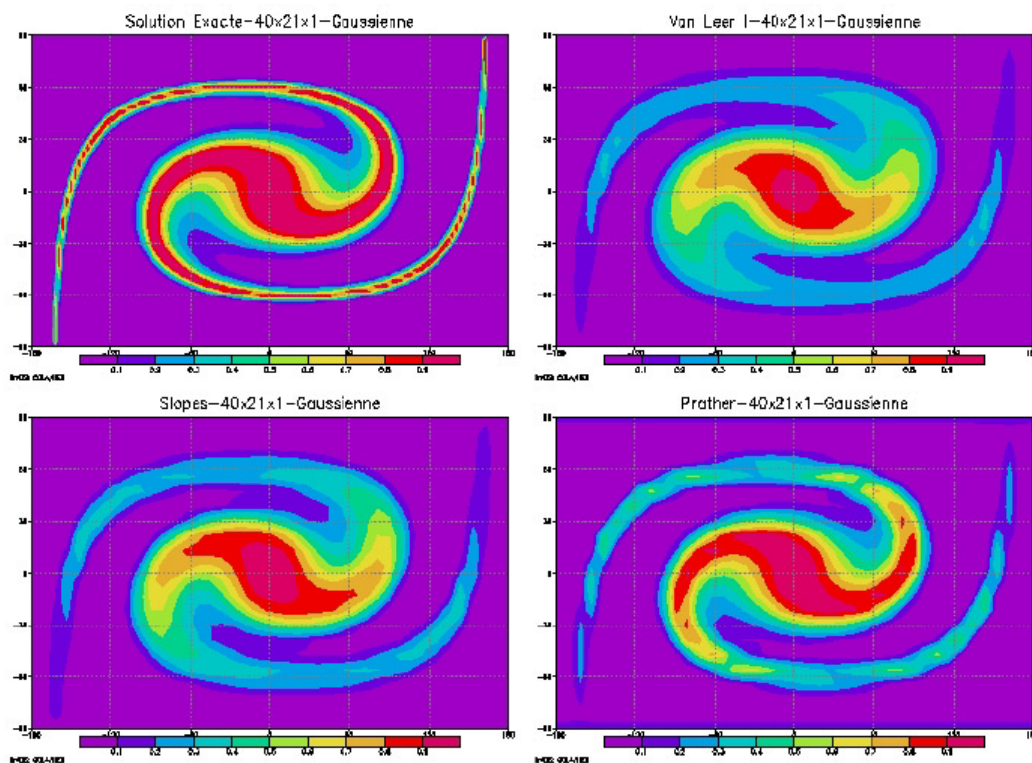
II.1.2. Les résultats numériques du test

Les paramètres importants à fixer dans ce cas test sont le choix du nombre de CFL (CFL signifie Courant-Friedrich-Levy, c'est un synonyme du nombre de courant, c'est la mise sous forme adimensionnelle du pas de discrétisation en temps utilisé pour la résolution numérique des équations différentielles en mécanique des fluides), pris égal à 0.5 pour toutes les mailles de la sphère et le nombre de tour souhaité pour la partie centrale de la spirale qui représente la distance d'advection, pris égal à 1.

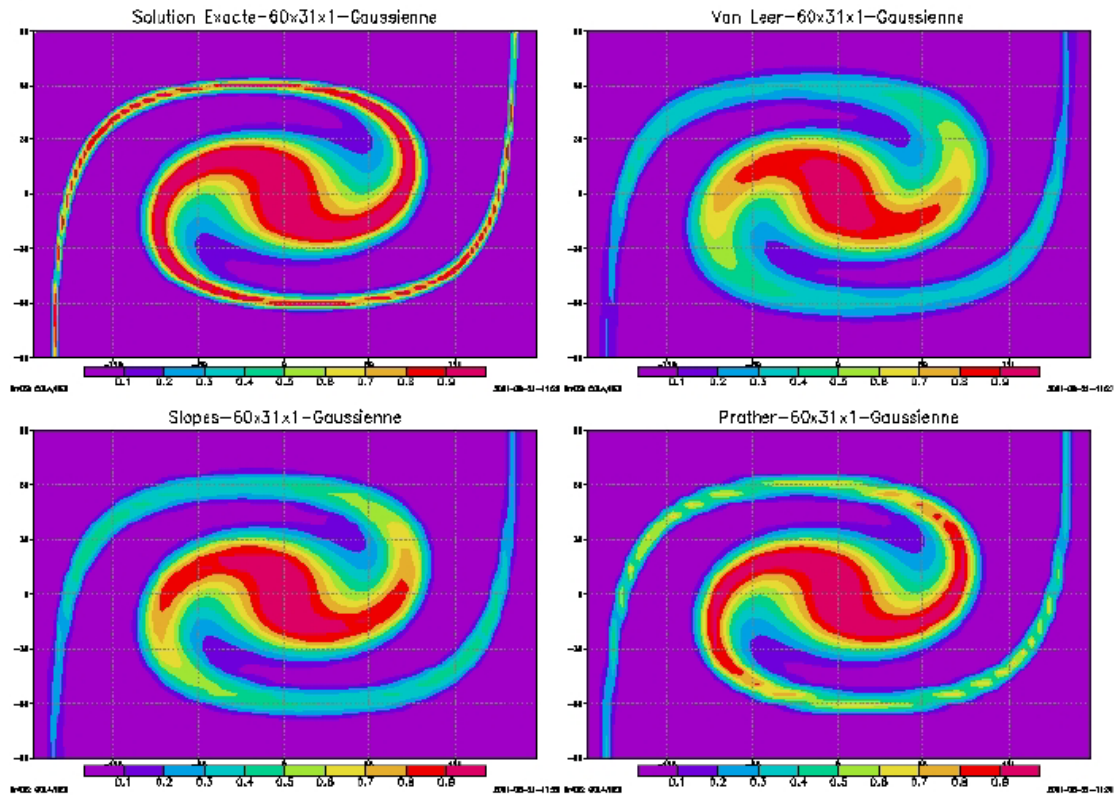
Nous nous sommes servis de ce cas test pour valider dans un 1^{er} temps la consistance des schémas d'advection qui est, comme nous l'avons vu au chapitre précédent, une propriété

importante. Ainsi, nous nous sommes donc fixés une concentration de traceur égale à 1 sur toute la surface du globe. Après advection la concentration est restée la même à la précision de la machine près (simple précision sur station Sun Ultra, c'est à dire 10^{-6}).

Les résultats obtenus sont donnés ci contre pour les 3 résolutions retenues. Etudions tout d'abord les résultats à résolution fixée. Le classement en terme de précision est toujours le même : Prather suivi de SLOPES suivi de MUSCL. Ce dernier reste le schéma le plus diffusif. A basse résolution $40 \times 21 \times 1$, la structure filamenteuse fine de l'escargot (d'un ordre de grandeur inférieure à la taille des mailles même en résolution $120 \times 61 \times 1$) a complètement disparue, pour être remplacé par une structure beaucoup plus grossière. A l'opposé, le schéma de Prather permet une très bonne reconstruction des filaments qui commencent à apparaître même en résolution $40 \times 21 \times 1$. Le résultat obtenu avec Prather en $120 \times 61 \times 1$ est assez impressionnant puisqu'il est quasi identique à la solution exacte.



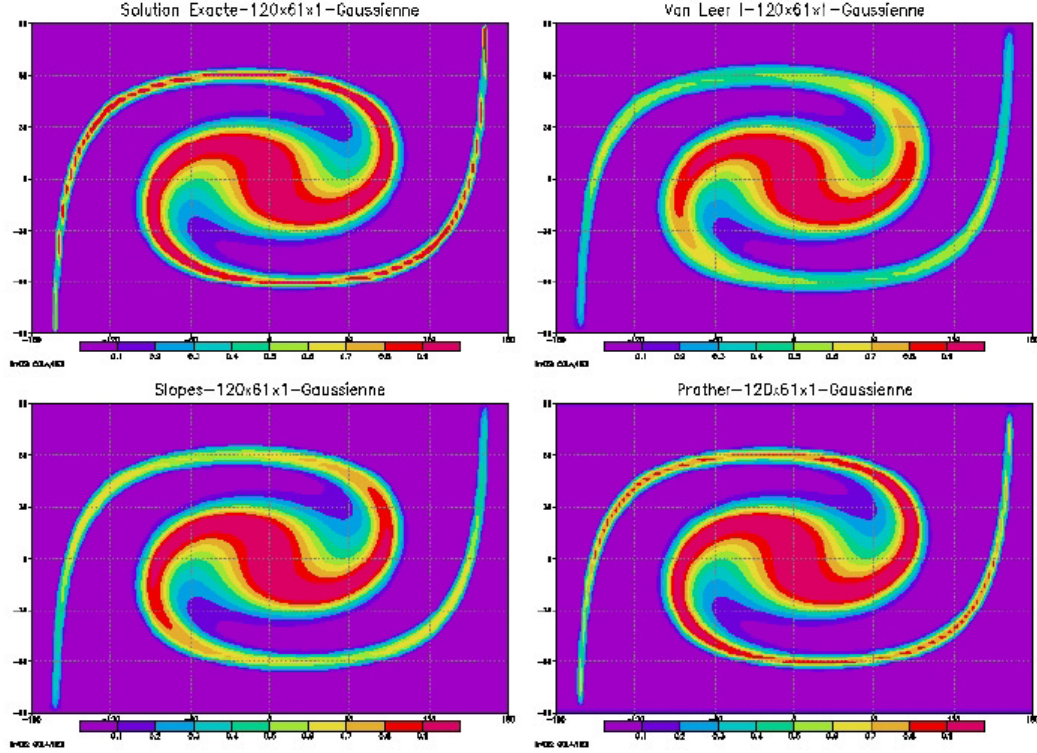
Parlons à présent de l'impact de la résolution sur les différents schémas. On remarque par exemple que la précision obtenue avec SLOPES pour la résolution $120 \times 61 \times 1$ est la même qu'avec Prather pour la résolution $60 \times 31 \times 1$. Dans le même ordre d'idée, on peut comparer MUSCL en $120 \times 61 \times 1$ et SLOPES en $60 \times 31 \times 1$. Ces remarques ne sont pas anodines, elles mettent en relief une question importante : est-il préférable d'utiliser un schéma d'ordre faible à résolution élevée ou un schéma d'ordre élevé à résolution faible ? Le facteur limitant reste dans tous les cas le temps de calcul.



Pour répondre à cette question, nous avons rassemblé dans le tableau ci dessous les temps de calculs des simulations lancées pour chaque schéma à chaque résolution sur une station SUN Ultra. Bien évidemment, l'augmentation du temps CPU est proportionnelle à la valeur du nombre de CFL choisi, nous avons conservé 0.5.

	40x21x1	60x31x1	120x61x1
MUSCL	1 s	3.2 s	21.2 s
SLOPES	2.6 s	9.0 s	67.5 s
Prather	3.1 s	10.4 s	80.0 s

D'ores et déjà, on voit que le coût en temps de calcul est, comme l'on s'attendait, bien plus important pour Prather. L'écart entre MUSCL et les 2 autres schémas est impressionnant surtout pour la haute résolution. La précision a un coût mais les temps de calcul en 120x61x1 mettent un frein, à l'heure actuelle, à l'utilisation de Prather de manière généralisée dans le GCM puisqu'il faut tenir compte des 19 niveaux verticaux qui viennent s'ajouter. Par contre, en ce qui concerne le choix entre résolution et ordre du schéma, il semble clair que sur une machine scalaire, l'option à privilégier est la combinaison d'un schéma d'ordre élevé avec une faible résolution.



II.2 Un test de rotation pure : la rotation solide

Après avoir réalisé un test de déformation, nous allons réaliser un test qui permettra de tester les capacités d'un schéma à transporter dans n'importe quelle direction une distribution donnée sans la déformer. Nous avons effectué ce test 2D sur une sphère, les résultats seront quant à eux observés avec la même projection que pour l'escargot.

II.2.1 Explications analytiques du test

On considère un écoulement bidimensionnel et à divergence nul. L'équation de base sur la sphère reste l'équation (19).

Pour construire la rotation solide, partons d'un cas simple. Considérons la rotation d'une distribution autour de l'axe de la terre à latitude constante. Ce cas particulier porte le nom de rotation solide zonale, si l'on se fixe une vitesse angulaire ω , on a alors :

$$\omega = \frac{u}{a \cos(\phi)} \quad (27)$$

A partir de là, on calcule les composantes zonales et méridiennes ($v=0$) du vent, des quels on déduit le potentiel:

$$\psi = -a^2 \omega \sin(\phi) \quad (28)$$

Dans le cas général, d'une rotation solide autour d'un axe quelconque, il suffit d'effectuer un changement de repère. On considère alors le repère dans lequel le déplacement de la distribution est une rotation solide zonale, on est alors ramené au cas précédent. On obtient donc ainsi la forme du potentiel.

Les résultats après calculs sont :

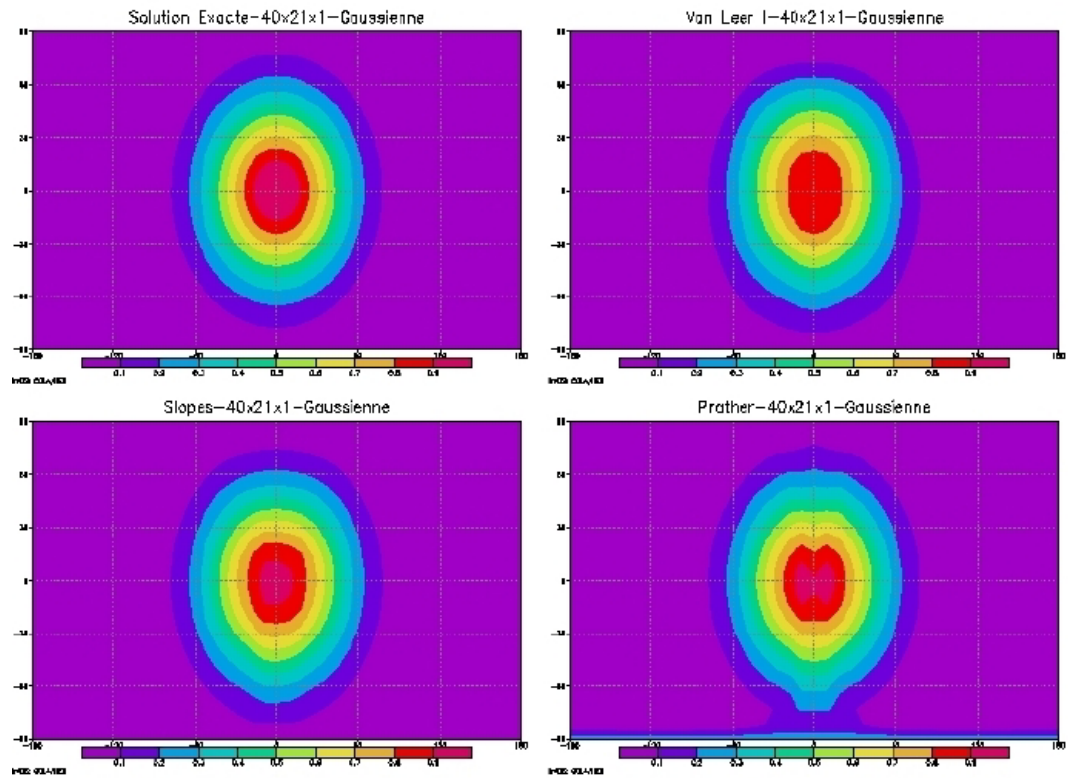
$$\psi = a(V_0 \cos(\phi)\sin(\lambda) - U_0 \sin(\phi)) \quad (29)$$

Une fois ce potentiel obtenu, la démarche reste la même que celle réalisée pour l'escargot. On obtient au bout du compte la loi horaire du mouvement qui nous donne la solution analytique du problème. Celle ci servira de référence pour comparer les résultats numériques.

II.2.2. Les résultats numériques du test

Plusieurs possibilités de rotation sont possibles. Les rotations zonales, dont nous avons déjà parlé, mais aussi les rotations à longitude constante également appelées advection transpolaire. En combinant ces 2 types : advection transpolaire et rotation zonale, on peut construire une rotation autour de n'importe quel axe. De manière générale, un bon schéma d'advection doit permettre après plusieurs tours de Terre de retrouver la même distribution qu'au départ. A l'opposé, un mauvais schéma déformera le profil. Nous avons choisi de n'exposer ici que les résultats obtenus à basse résolution 40x21x1 pour un test d'advection transpolaire, les rotations zonales étant équivalentes à des tests d'advection 1D que nous ferons plus tard. L'intérêt de l'advection transpolaire est de pouvoir tester les éventuels problèmes liés au traitement numérique de l'advection aux pôles.

Pour ce test nous avons choisi une distribution gaussienne centrée au point 0° de longitude et 0° de latitude, un nombre de CFL fixé à 0.5 et 1 seul tour de Terre. Pour finir, nous allons évoquer une autre source de problème qui est cette fois liée au test lui même. En effet, dans celui ci, le nombre de courant que l'on choisi est constant pour toutes les mailles. Or le domaine 2D maillé est sphérique. Ainsi, toutes les mailles n'ont pas la même surface et ne contiennent pas la même masse d'air. Leur dimension longitudinale diminue à mesure que l'on s'éloigne de l'équateur. Ce phénomène s'accroît d'ailleurs lorsque l'on augmente la résolution. On s'expose donc à advecter pour les plus petites mailles une masse d'air trop grande comparativement à leur propre masse, ce qui peut rendre le processus numérique instable. Si l'on veut éviter ce problème, il suffit de choisir le nombre de CFL le plus contraignant, c'est à dire celui qui correspond aux plus petites mailles. Néanmoins, ce problème va nous permettre de comparer, en plus de la diffusivité, la robustesse des différents algorithmes.



Tous les schémas déforment plus ou moins le profil en lui donnant un aspect plutôt ovale. Néanmoins en ce qui concerne la précision, c'est toujours Prather qui semble le moins diffusif. Par contre, la robustesse des algorithmes est mise à mal. Seul MUSCL réussit sans trop de problème. Ceci n'est pas étonnant, puisque pendant son codage au LMD, il a été enrichi d'une procédure permettant d'advecter en restant stable même avec de grands nombre de CFL. Par contre, on voit que Prather a de gros problèmes, il n'est donc pas utilisable dans l'état actuel.

Chapitre IV

Tests du schéma PPM utilisé au GSFC

Nous avons utilisé une version 3D du schéma PPM codée par Lin au Goddard Space Flight Center. Il a fallu dans un premier temps exécuter une série de test sur un schéma 1D, puis interfacer le code 3D avec les programmes de tests 2D (escargot et rotation solide) et enfin implanter ppm3D.F dans le code LMDZ.3.3.

Nous avons déjà décrit au chapitre II la méthode qui permet d'aboutir au schéma d'advection PPM (Piecwise Parabolic Method). Ce schéma PPM que nous appellerons « non contraint » n'est pas toujours satisfaisant, il convient pour certaines utilisations de le rendre monotone, semi monotone ou positif défini. Dans ce chapitre nous donnerons les procédures utilisée pour assurer de telles propriétés au schéma en 1D, la méthode du *flux splitting* permettant, comme nous l'avons déjà dit, de généraliser ces résultats à des dimensions supérieures.

I. Présentation du schéma et de ses variantes

Nous allons proposer trois variantes pour PPM (PPM monotone, PPM semi-monotone et PPM positif défini) qui viennent compléter la version non contrainte.

I.1. La version monotone de PPM

Dans la version non contrainte, la valeur de $q_{L,i}$ est la même que $q_{R,i-1}$ ce qui est juste dans la plupart des cas. Cependant, il arrive qu'un tel choix conduise à une fonction d'interpolation qui prend des valeurs en dehors de $[q_{L,i}; q_{R,i}]$. Ceci arrive dans deux cas.

1. Premièrement si q_i est un maximum ou un minimum local . On doit alors choisir une fonction d'interpolation constante, c'est à dire que $q_{L,i} = q_{R,i} = q_i$ et donc $q_6=0$. Ceci peut se résumer de la sorte :

$$\text{Si } (q_{R,i} - q_i^n)(q_i^n - q_{L,i}) \leq 0 \text{ alors } q_{L,i} \rightarrow q_i^n \text{ et } q_{R,i} \rightarrow q_i^n .$$

2. Deuxièmement si q_i se situe bien dans $[q_{L,i}; q_{R,i}]$ mais est tellement proche d'une des deux valeurs que le polynôme d'interpolation peut prendre des valeurs en dehors de cet intervalle. On est donc encore amené à corriger les coefficients de la parabole afin de conserver la monotonie. Pour bien comprendre cela, reprenons le polynôme du second degré qui modélise la distribution du traceur dans une maille :

$$q(x) = q_L + (\Delta q + q_6)x - q_6 x^2 \text{ avec } x \in [0,1]$$

Une étude de signe rapide permet de séparer plusieurs cas de figure :

- Si $\left| \frac{\Delta q}{q_6} \right| \geq 1$ alors q est monotone dans $[0,1]$
- Si $\left| \frac{\Delta q}{q_6} \right| < 1$ alors q n'est pas monotone $\begin{cases} \text{si } q_6 > 0 \text{ la parabole a un maximum} \\ \text{si } q_6 < 0 \text{ la parabole a un minimum} \end{cases}$ dans $[0,1]$

C'est le second cas qui nous intéresse puisque le but de nos corrections est d'éviter la création de nouveaux extrema. Supposons donc que nous sommes dans ce cas, alors les traitements à apporter diffèrent suivant le signe de Δq , c'est à dire suivant les valeurs de q_L et q_R .

- Si $\Delta q > 0$, une condition équivalente est $-\Delta q^2 > q_6 \Delta q$

$$\text{alors } q_{R,i} \rightarrow 3q_i^n - 2q_{L,j}$$

- Si $\Delta q < 0$, une condition équivalente est $\Delta q^2 < q_6 \Delta q$

$$\text{alors } q_{L,i} \rightarrow 3q_i^n - 2q_{R,j}.$$

Dans le programme d'advection ppm3d.F, ce sont ces 3 procédures qui garantissent la monotonie. Elles sont codées en Fortran de la manière suivante (DC(i) est la pente, q(i) représente la valeur du traceur au point i, qR,qL,q6 sont les variables déjà utilisées au chapitre II) :

```
do 100 i=1, IM
  if (DC(i).eq.0.) then
    qR(i) = q(i)
    qL(i) = q(i)
    q6(i) = 0.
  else
    dq1 = qR(i) - qL(i)
    dq2 = dq1**2
    q6dq = q6(i)*dq1
    if (q6dq .lt. -dq2) then
      q6(i) = 3.*(qL(i)-q(i))
      qR(i) = qL(i) - q6(i)
    elseif (q6dq .gt. dq2) then
      q6(i) = 3.*(qR(i)-q(i))
      qL(i) = qR(i) - q6(i)
    endif
  endif
100 continue
```

I.2. La version semi-monotone de PPM

Cette fois, il faut supprimer uniquement les nouveaux minima créés. Reprenons l'étude de cas précédente, on peut montrer qu'une condition équivalente à la présence d'un minimum est $\Delta q < -q_6$. Une fois que l'on a repéré un minimum, il faut envisager un traitement différent suivant les cas. Si celui-ci existait déjà dans la distribution initiale, on est ramené au cas 1. du paragraphe précédent. Par contre, si le minimum est crée dans le processus de construction de la parabole, il faut l'éliminer. On doit alors revenir à la discussion sur le signe de Δq comme dans le cas 2. du paragraphe précédent. En utilisant les même variables que pour le cas monotone, nous proposons donc la procédure Fortran suivante :

```
do 150 i=1, IM
  if (abs(qR(i)-qL(i)) .GE. -q6(i)) go to 150
  if (q(i).lt.qR(i) .and. q(i).lt.qL(i)) then
    qR(i) = q(i)
    qL(i) = q(i)
    q6(i) = 0.
  elseif (qR(i) .gt. qL(i)) then
    q6(i) = 3.*(qL(i)-q(i))
    qR(i) = qL(i) - q6(i)
```



```

else
    q6(i) = 3.*(qR(i)-q(i))
    qL(i) = qR(i) - q6(i)
endif
150 continue

```

I.3. La version définie positive de PPM

Il faut supprimer cette fois uniquement les valeurs négatives qui pourraient apparaître par contre les minima ou les maxima sont autorisés. Il faut donc calculer le minimum de la parabole construite (fmin) dans [0,1] puis tester si cette valeur est négative. Si c'est le cas, on lui applique les 3 traitements décrits dans le cadre de la version monotone. Le module en Fortran correspondant est le suivant :

```

R12=0.5
do 250 i=1, IM
    if(abs(qR(i)-qL(i)) .GE. -q6(i)) go to 250
    fmin = q(i) + 0.25*(qR(i)-qL(i))**2/q6(i) + q6(i)*R12
    if(fmin.ge.0.) go to 250
    if(q(i).lt.qR(i) .and. q(i).lt.qL(i)) then
        qR(i) = q(i)
        qL(i) = q(i)
        q6(i) = 0.
    elseif(qR(i) .gt. qL(i)) then
        q6(i) = 3.*(qL(i)-q(i))
        qR(i) = qL(i) - q6(i)
    else
        q6(i) = 3.*(qR(i)-q(i))
        qL(i) = qR(i) - q6(i)
    endif
250 continue

```

II. Etude du comportement du schéma sur des tests 1D

II.1. Présentation des paramètres importants des tests

Les tests 1D permettent d'illustrer clairement les problèmes de diffusion et de dispersion des schémas numériques. Nous avons comparé le schéma PPM et ses variantes aux schémas d'advection précédemment évoqués (MUSCL, SLOPES et Prather) dans un cas d'advection 1D avec vent constant sur un domaine périodique, pour différentes distributions (gaussienne, triangle et carré). Les 3 paramètres importants dans les tests 1D sont :

- la taille des structures en nombre de point, nous avons pris 40 points de discrétisation sur l'axe des abscisses, l'axe vertical est en unité arbitraire.
- le nombre de courant ou nombre de CFL dont nous avons déjà parlé lors des tests 2D de l'escargot et de la rotation solide. Ajoutons ici qu'en temps normal, pour conserver la stabilité d'un schéma d'advection, il est plus prudent de garder un nombre de CFL inférieur à 1.
- le nombre de pas de temps écoulés. Nous avons 200,80 et 44 pas de temps respectivement pour les nombres de courant 0.2, 0.4 et 0.9.

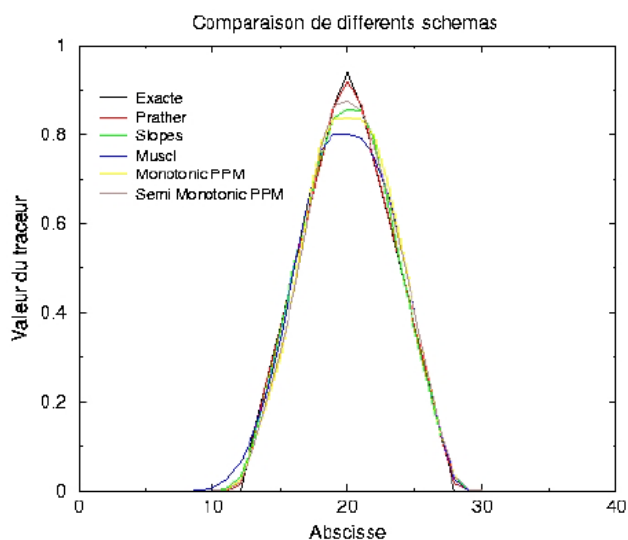
Les résultats obtenus vont nous permettre de tester l'influence du nombre de courant sur les schémas pour un profil donné, mais aussi de comparer la précision des schémas suivant les profils.

II.2. Dépouillement des résultats

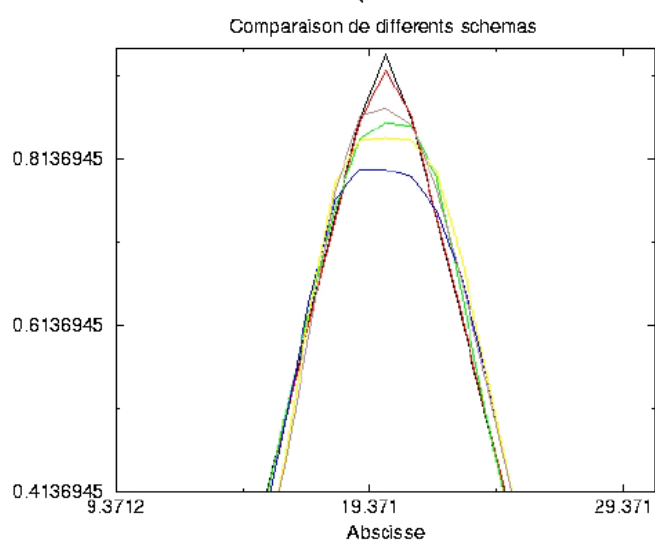
Considérons tout d'abord les profils gaussiens et triangulaires. On remarque que quel que soit le nombre de courant le schéma de Van Leer I (MUSCL) est toujours le plus diffusif et Prather le plus précis. Par contre, la différence entre les autres schémas (PPM-variantes, SLOPES) est moins nette. Pour le triangle, on constate pour les faibles nombres de courant que la version PPM monotone est moins précise que SLOPES. Par contre, la variante semi-monotone semble meilleure. Pour un nombre de courant élevé (0.9), les 2 schémas PPM précédents se comportent mieux que SLOPES. Passons au profil carré, cette distribution nous intéresse particulièrement puisqu'à terme, nous souhaitons modéliser l'advection de l'ozone dans le modèle 3D global. Or nous savons qu'à la tropopause, l'ozone connaît de très forts gradients verticaux. Ainsi, le schéma d'advection utilisé doit transporter avec précision un profil présentant une discontinuité. Le schéma de Prather utilisé dans le cadre de notre étude n'est pas monotone, ceci est particulièrement clair dans les résultats d'advection d'un profil carré, surtout aux faibles nombres de courant. SLOPES souffre du même problème. MUSCL est un schéma monotone mais il souffre d'une faible précision due à son ordre, c'est donc dans cet exemple que PPM monotone surpasse les autres modèles. Il paraît donc bien adapté à la représentation des distributions d'ozone troposphérique. Ajoutons aussi que les propriétés des autres variantes de PPM sont bien visibles. Le schéma positif défini PPM permet l'apparition de maxima parasites mais reste positif. La version de base du schéma PPM (PPM non contraint) présente peu d'intérêt puisqu'elle n'assure ni la monotonie ni la positivité du champ.

Un autre point important reste à examiner : celui du temps CPU associé aux schémas PPM. Cette étude va être réalisée dans le cadre des tests 2D.

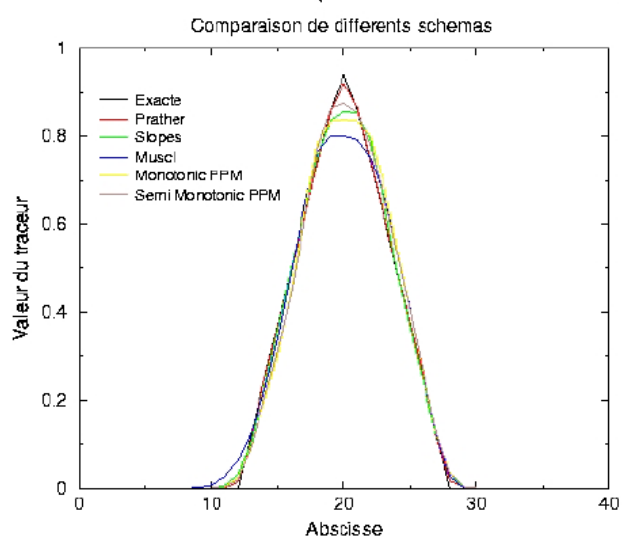
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



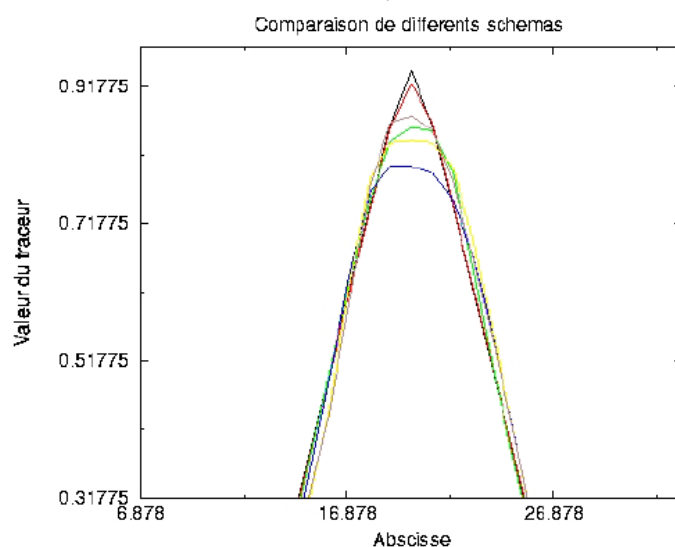
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



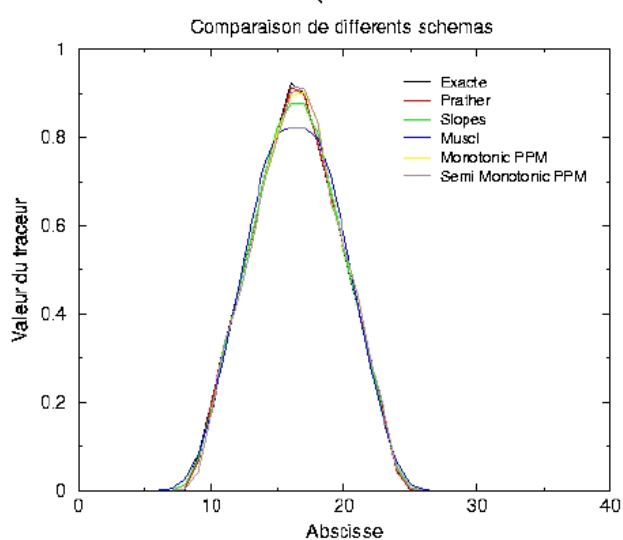
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



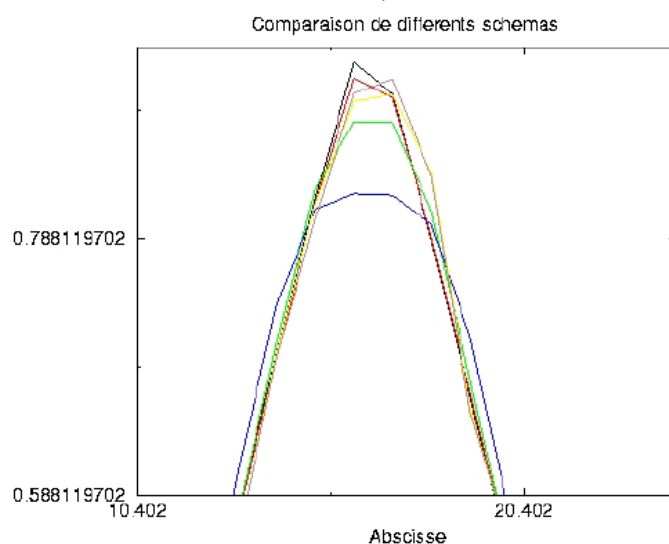
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



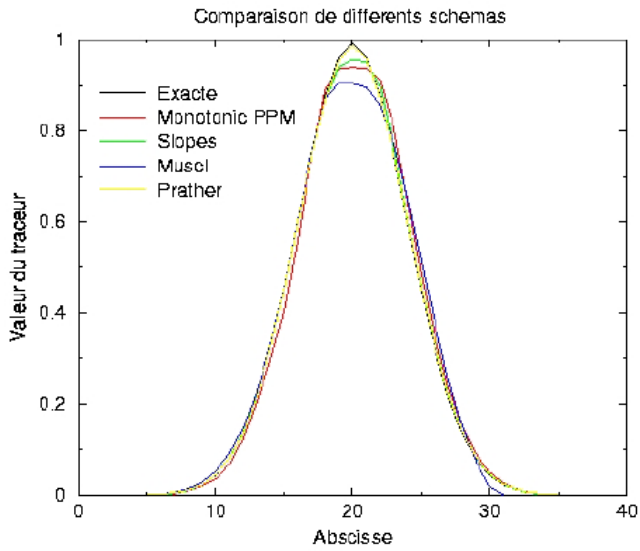
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



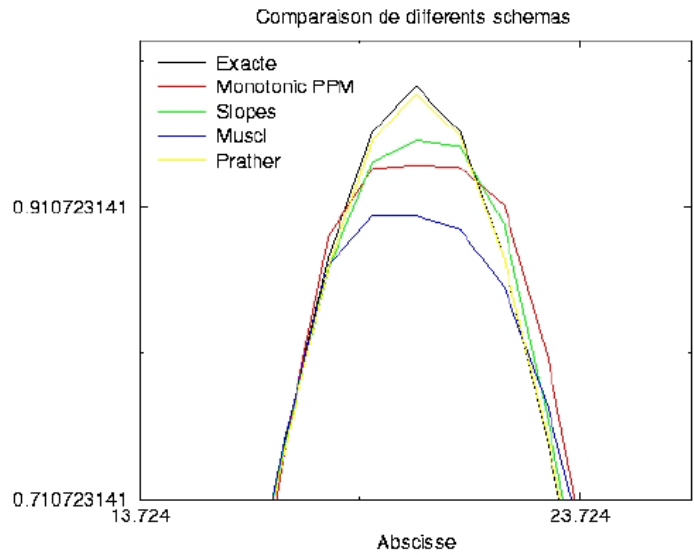
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



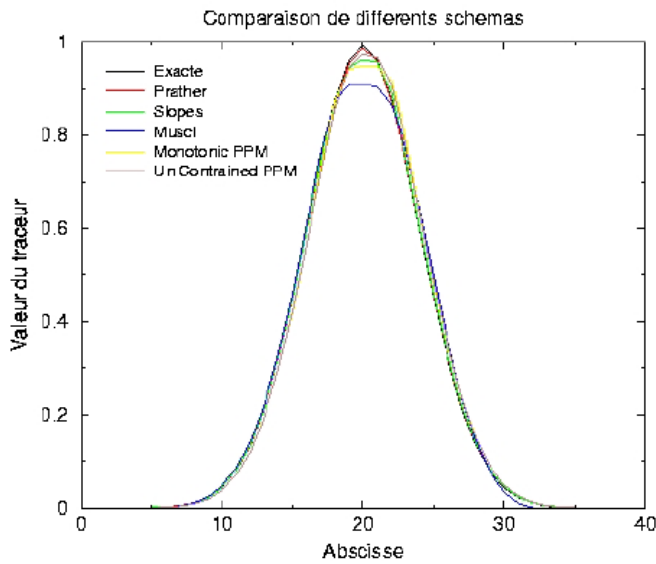
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



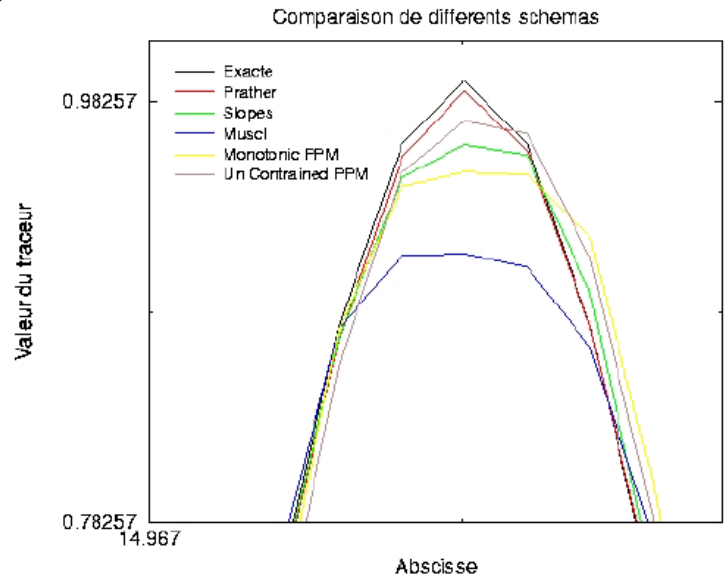
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



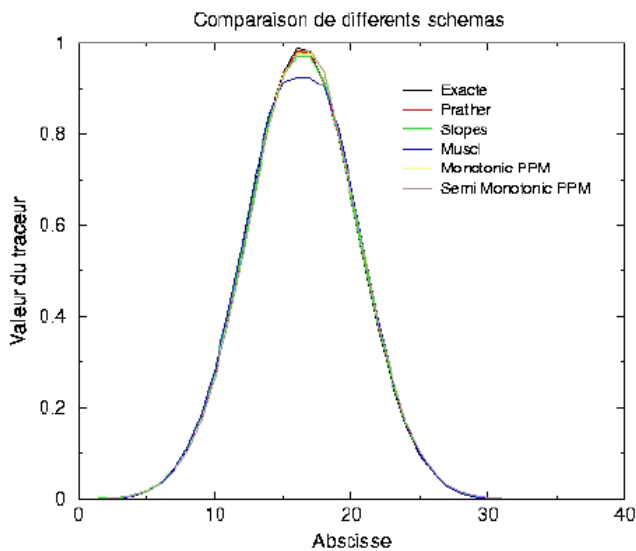
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



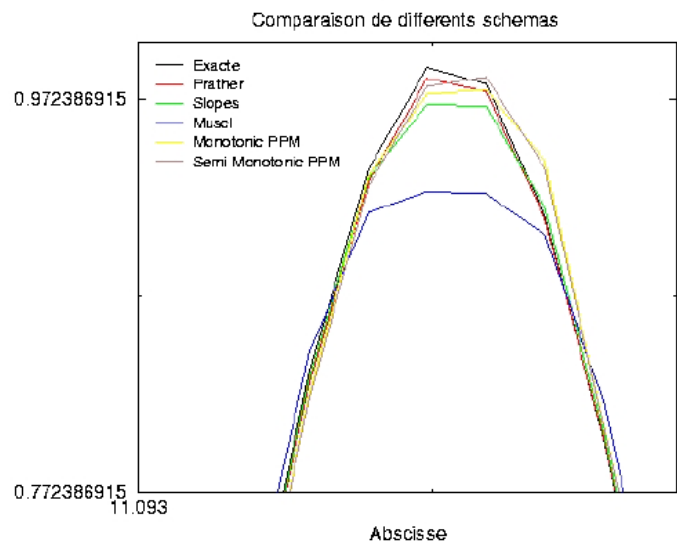
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



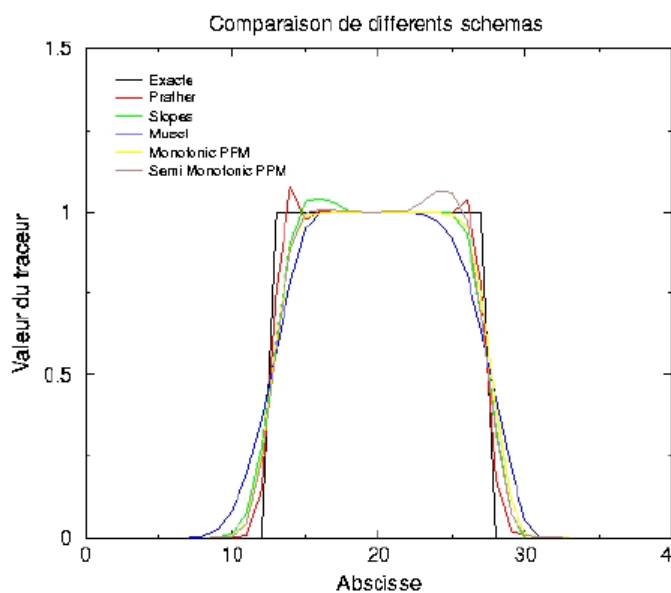
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



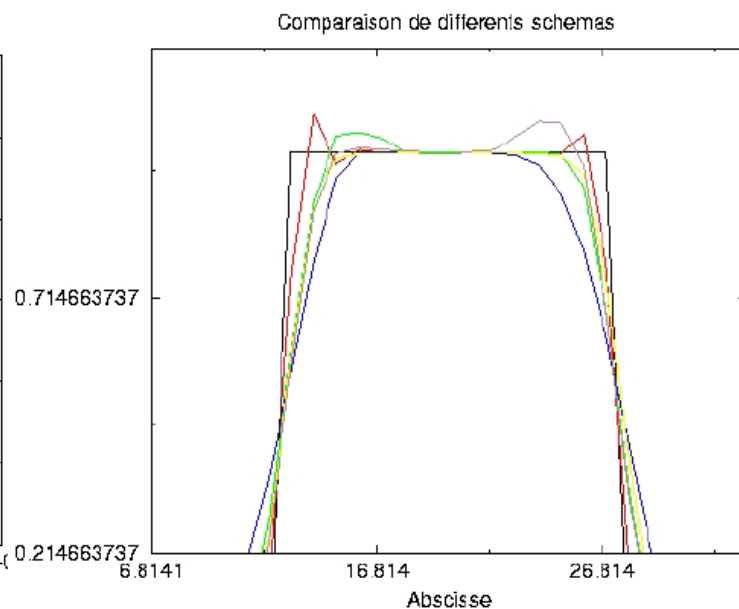
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



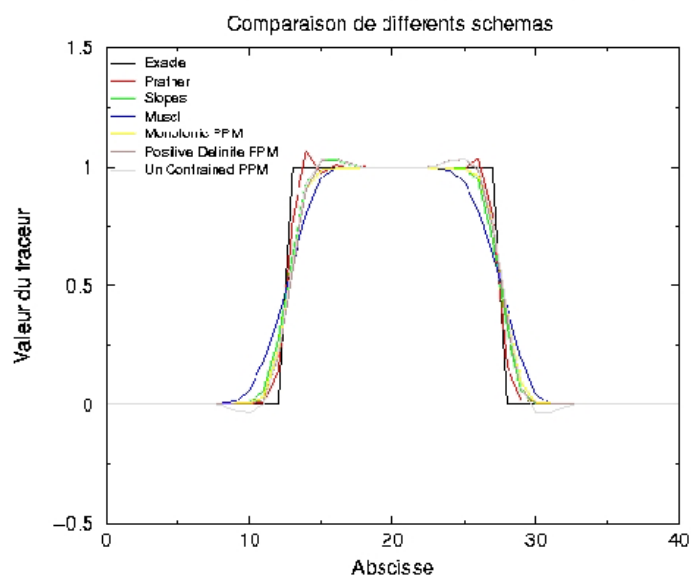
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



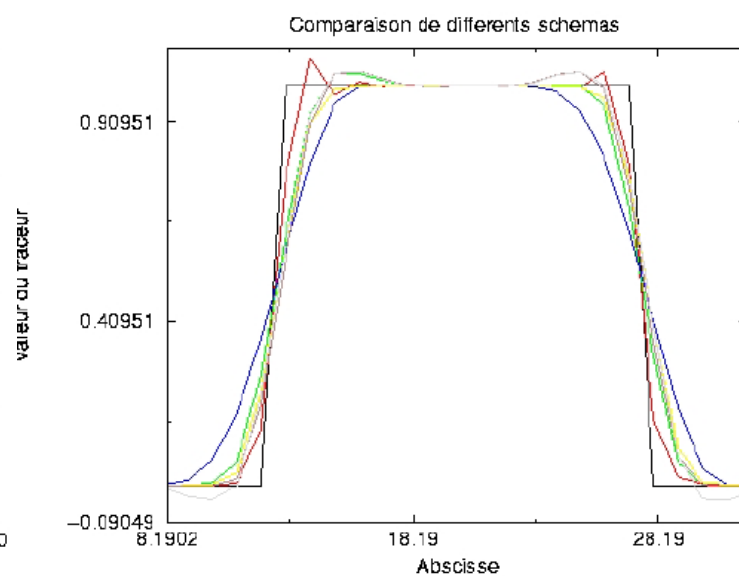
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.2)



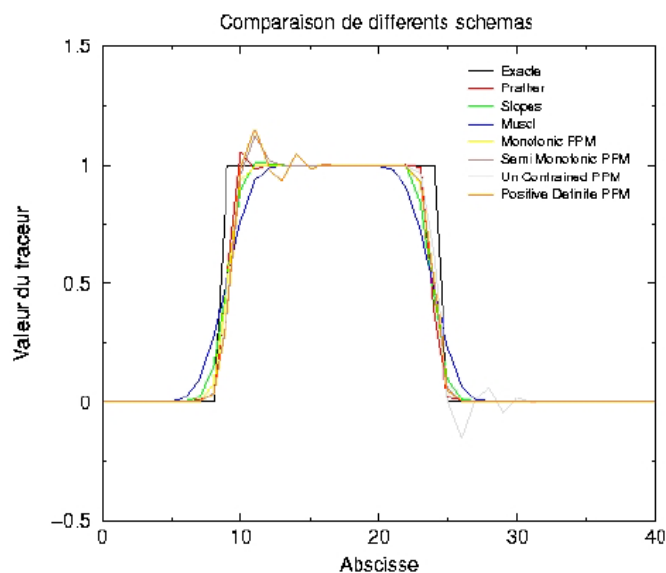
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



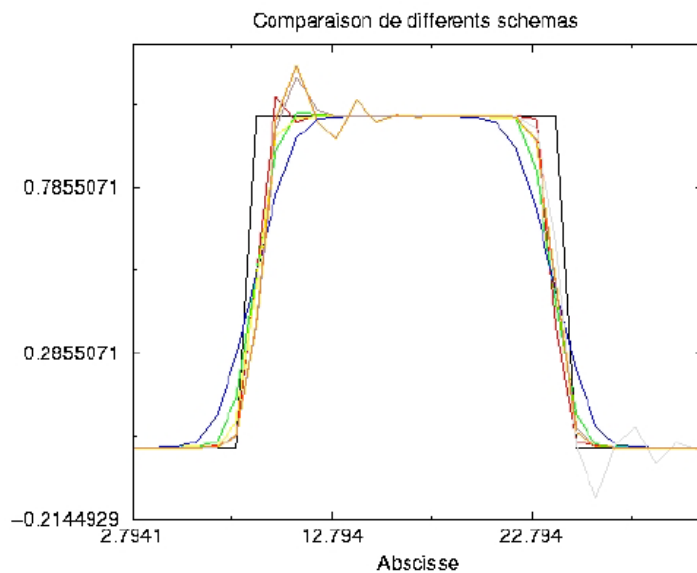
Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.5)



Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



Test d'advection 1D (Nombre de courant=0.9)



III. Etude du comportement du schéma sur des tests 2D

Avant de tester les différents schémas PPM dans une configuration normale de GCM, c'est à dire notamment en 3D, il nous a semblé utile de valider après les tests 1D, une série de test 2D identiques à ceux utilisés pour les autres schémas, c'est à le test de déformation (l'escargot) et le test de rotation pure (la rotation solide). Rappelons que ces tests présentent l'avantage de posséder une solution analytique, ce qui permet une validation immédiate des résultats.

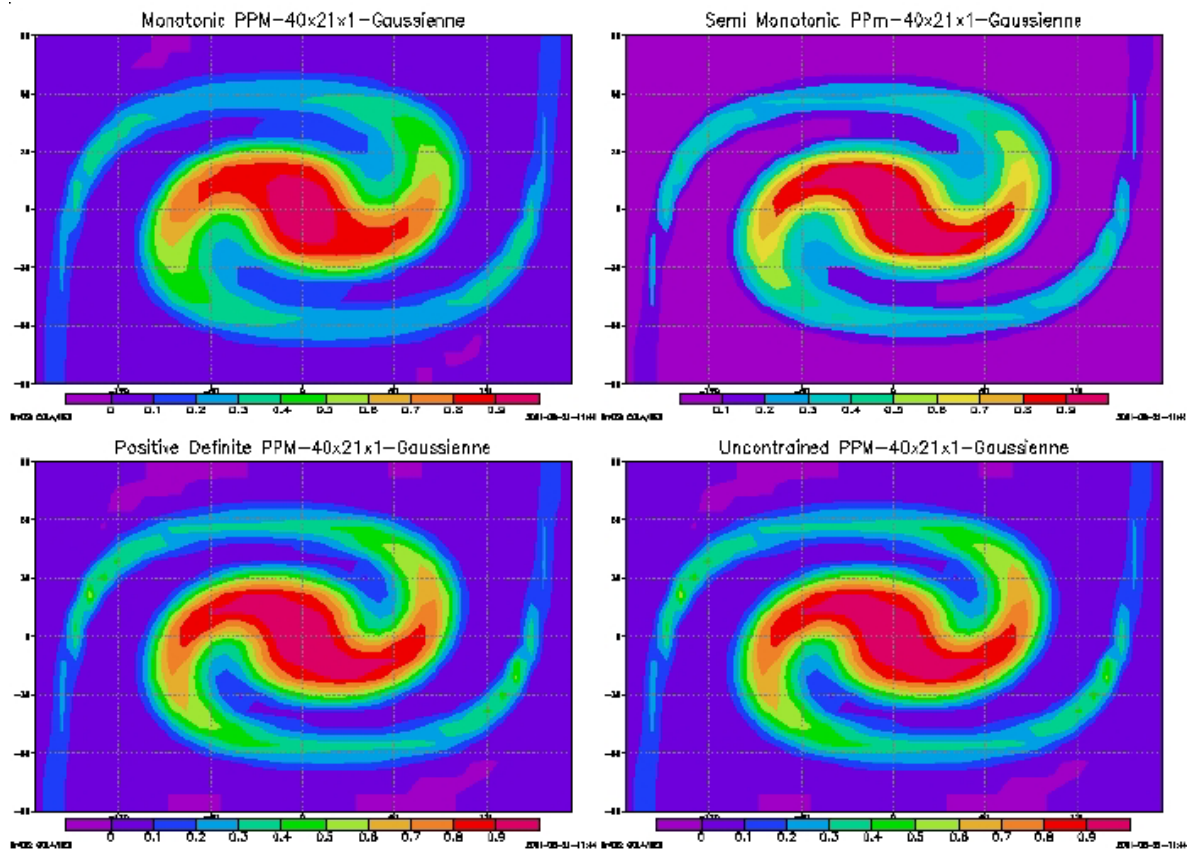
III.1 Le cas test de l'escargot

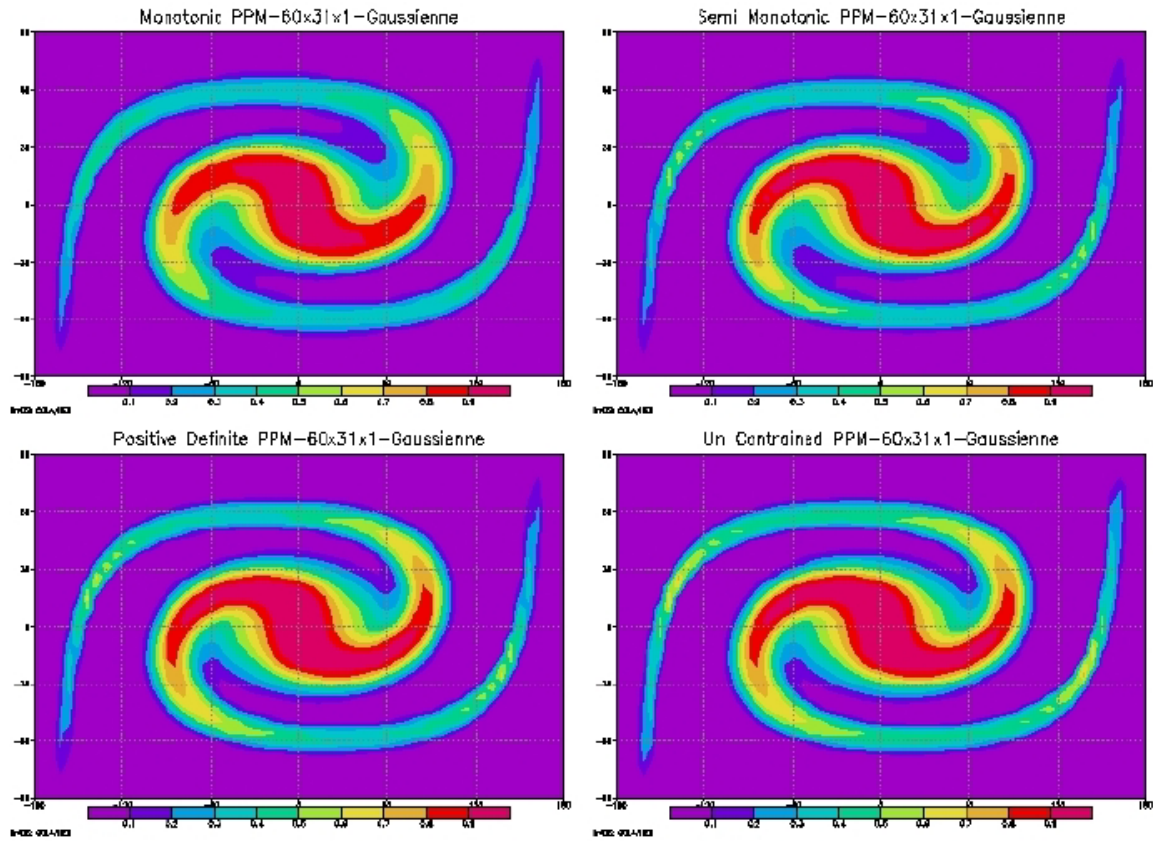
Pour le cas test de l'escargot, les paramètres ont été fixés aux mêmes valeurs que lors des simulations avec les schémas de MUSCL, SLOPES et Prather. Ainsi, le nombre de CFL vaut 0.5 et l'on fait effectuer 1 tour à la partie centrale de la spirale avant d'arrêter.

III.1.1. Les figures

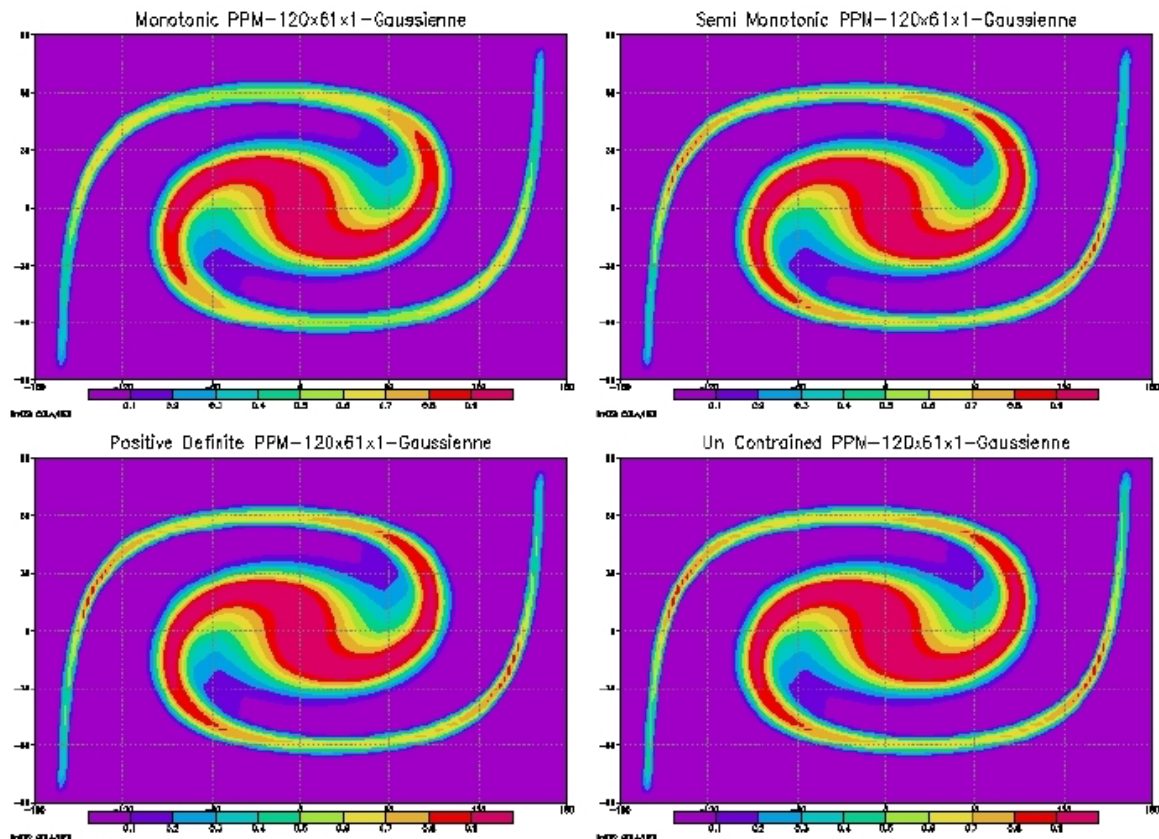
Tout d'abord, nous avons effectué les tests de consistance comme pour les autres schémas numériques d'advection. Les résultats sont satisfaisants puisque après un tour, la valeur constante du traceur égale à 1 sur toute la sphère est conservée à la précision de la station SUN Ultra près (simple précision 10^{-6}).

Nous donnons ici les résultats obtenus en 2D avec les différentes versions du schémas PPM. Ces résultats sont bien entendus à comparer à ceux obtenus avec MUSCL, SLOPES et Prather.





Pour une résolution fixée, on constate toujours la même hiérarchie des schémas PPM pour ce cas test. PPM monotone semble être le moins performant suivi ensuite par les 3 autres quasi équivalents. Néanmoins il faut se méfier de certains schémas même s'ils semblent bien se comporter ici. Ainsi les versions semi-monotone et non contrainte peuvent générer comme nous l'avons vu dans les tests 1D des valeurs négatives du champ, ce qui n'est pas autorisé pour certaines simulations. Ainsi seule la version positive définie semble réellement intéressante parmi toutes les alternatives possibles.



En ce qui concerne la comparaison avec les autres schémas, on peut dire que pour toutes les résolutions, les schémas PPM reproduisent des structures filamenteuses plus fines que MUSCL. Le schéma PPM monotone donne des résultats quasi équivalents à SLOPES mais ceux de la version positive semblent être meilleurs. Bien sûr Prather reste le schéma le plus précis mais le temps de calcul qu'il implique comme nous l'avons déjà vu rend son utilisation généralisée difficile compte tenu des capacités actuelles des machines.

Pour achever cette série de tests comparatifs, nous avons aussi réalisé une étude de temps de calcul pour PPM. C'est ce que nous proposons de commenter dans les 2 prochains paragraphes.

III.1.2. Les temps de calculs sur station SUN Ultra

Continuons donc notre étude comparative en considérant maintenant les temps de calcul. Les paramètres des simulations sont ceux précédemment énoncés. Sur station SUN Ultra, les résultats sont :

	40x21x1	60x31x1	120x61x1
MUSCL	1 s	3.2 s	21.2 s
SLOPES	2.6 s	9.0 s	67.5 s
Prather	3.1 s	10.4 s	80.0 s
Monotone PPM	1.7 s	5 s	51.9 s
Semi Monotone PPM	1.6 s	5.1 s	55.6 s
Positif Défini PPM	1.6 s	5.2 s	63.3 s
Non contraint PPM	1.5 s	4.9 s	46.4 s

On voit déjà que les schémas PPM fonctionnent plus rapidement que SLOPES avec lequel ils sont en concurrence directe en terme de précision des résultats. Néanmoins cette différence semble s'atténuer lorsque l'on augmente la résolution. Ainsi, l'on passe d'un gain de temps de 50% en résolution 40x21x1 à 25% en 120x61x1.

Raisonnons à présent en termes de résultats obtenus sans se fixer de résolution comme nous l'avons déjà fait au chapitre III. Il est alors très intéressant de noter par exemple que PPM positif défini pour une résolution 60x31x1 donne des résultats aussi précis que MUSCL pour une résolution 120x61x1. Par contre le gain en temps de calcul sur Station SUN Ultra est spectaculaire puisque l'on passe de 5.2 s pour PPM (60x31x1) à 21.2 s pour MUSCL (120x61x1). On voit donc encore tout l'intérêt d'utiliser un schéma d'ordre élevé à faible résolution sur une machine scalaire.

III.1.3. Les temps de calculs sur NEC SX-5 (IDRIS)

Nous sommes ensuite passés sur le système NEC SX5 de l'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique qui est aussi le centre de calcul du CNRS) qui est constitué d'un ensemble de trois supercalculateurs vectoriels NEC SX-5 regroupant 40 processeurs et 224 Go de mémoire.

Les gains en temps CPU par rapport à une station SUN sont bien sûr importants, ainsi pour avoir des résultats significatifs, nous ne donnerons que les temps obtenus pour les résolutions pleine 120x61x1 et moitié 60x31x1.

	60x31x1	120x61x1
MUSCL	0.1 s	0.7 s
SLOPES	1.6 s	8.7 s
Prather	1.7 s	7.1 s
Monotone PPM	0.5 s	2.3 s
Semi Monotone PPM	0.6 s	2.4 s
Positif Défini PPM	0.6 s	2.4 s
Non contraint PPM	0.5 s	2.3 s

Pour la résolution la plus élevée, on peut gagner jusqu'à un facteur 30 en temps CPU (Schéma MUSCL) entre une station SUN Ultra et le supercalculateur NEC SX5. Viennent ensuite les schémas de type PPM, où le temps CPU est divisé par environ 25. Par contre les schémas de type SLOPES et Prather, beaucoup plus coûteux en terme de stockage, sont relativement désavantagés par un passage sur une machine vectorielle, on ne gagne qu'un facteur 10. Bizarrement le schéma SLOPES est moins rapide que Prather ceci s'explique peut être par le fait que la programmation de SLOPES dans le code n'est pas optimisée pour le calcul vectoriel. Nous n'avons pas réussi à donner une autre explication.

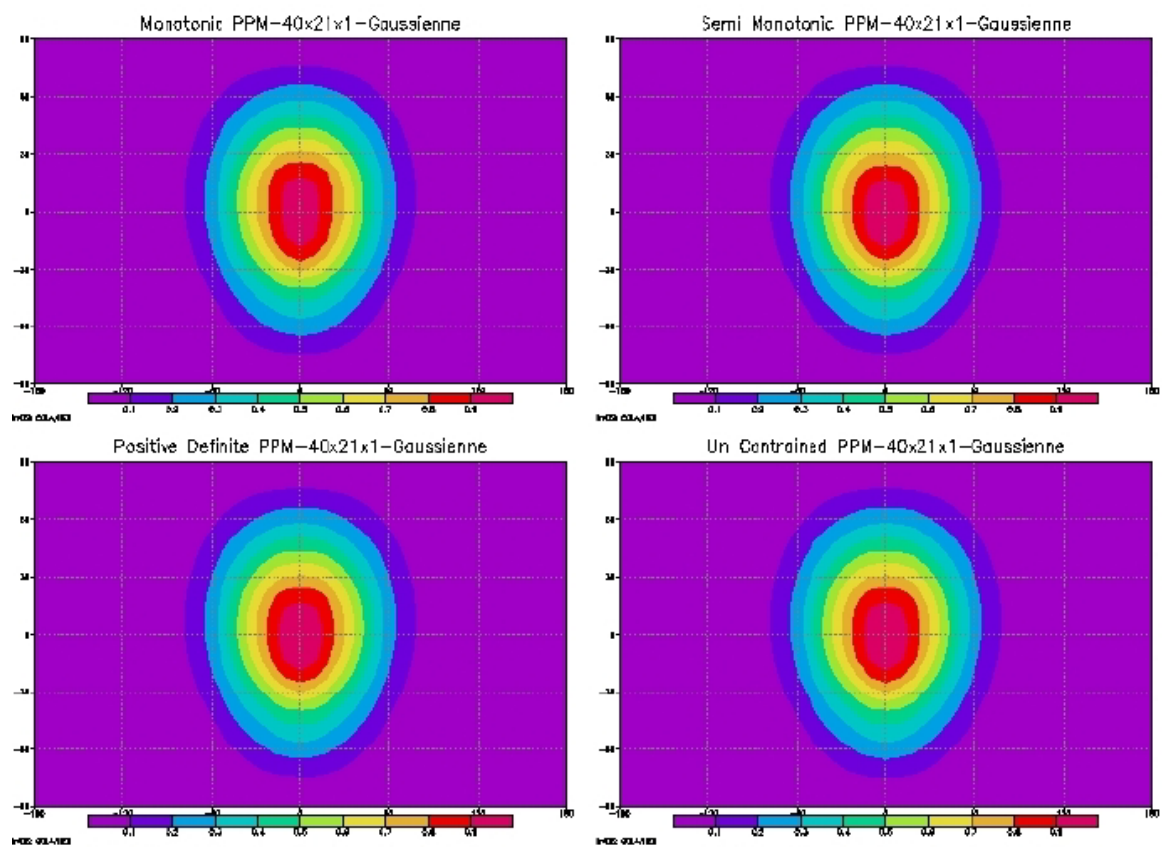
Un autre fait important est la différence de temps entre le schéma MUSCL qui est actuellement utilisé dans le LMDZ.3.3 et PPM suivant les machines. Quelque soit la résolution, l'écart en temps de calcul entre MUSCL et PPM s'accroît au détriment de PPM en passant d'une Station SUN au supercalculateur NEC. Par exemple l'écart en résolution 120x61x1 passe d'un facteur 2.5 sur SUN à un facteur 3.2 sur NEC.

En ce qui concerne l'impact des résolutions sur le temps de calcul, on constate bien l'avantage de l'architecture vectorielle. Par exemple, pour le schéma PPM monotone, on multiplie par 4 le temps CPU entre les résolutions 60x31x1 et 120x61x1 alors que l'on le multipliait par plus de 10 sur Station SUN Ultra. Le calcul vectoriel permet donc de tourner à haute résolution à moindre coût. Cette propriété est intéressante. En effet, rappelons qu'en terme de précision nous avons vu que MUSCL en résolution 120x61x1 était équivalent à PPM positif défini ou encore à SLOPES tout deux en résolution 60x31x1. Or il apparaît clairement que MUSCL-120x61x1 est tout aussi rapide que PPM positif défini-60x31x1 et devance même SLOPES-60x31x1 (en gardant une réserve quant à la non optimisation de SLOPES pour le calcul vectoriel). Ainsi, on voit bien que l'architecture vectorielle permet de favoriser indirectement les schémas d'ordre faible mais à condition de fonctionner à une résolution élevée.

III.2 Le cas test de la rotation solide

Nous avons ensuite testé les schémas PPM avec la rotation solide. Nous nous bornons encore à donner les résultats de l'advection transpolaire en résolution 40x21x1. Les paramètres sont fixés à 0.5 pour le nombre de CFL et à 1 tour de Terre.

Il n'y a pas de grosses différences de comportement entre les différentes versions. En terme de diffusion numérique, on est relativement proche d'un schéma de type SLOPES. Par contre la bonne chose à noter est qu'aucun problème de stabilité n'apparaît contrairement à SLOPES et à Prather dans les mêmes conditions. Le programme ppm3D.F semble donc être plus robuste que les 2 autres.



Chapitre V

Implantation du schéma PPM dans le GCM LMDZ.3.3

I. Les traceurs dans le GCM LMDZ.3.3

Le modèle LMDZ.3.3 fonctionne généralement avec au moins 4 traceurs : l'eau liquide, la vapeur d'eau, le radon et le plomb. On utilise souvent ces deux derniers traceurs car on dispose de nombreuses données d'observation, ce qui aide à valider les modifications effectuées sur le code. Néanmoins, seuls l'eau liquide et la vapeur d'eau sont nécessaires au bon fonctionnement du GCM.

On répartit généralement les traceurs dans 2 catégories. Les traceurs passifs comme justement le plomb et le radon qui sont transportés par la circulation sans rétroaction sur cette dernière et les traceurs actifs comme l'ozone qui au contraire rétroagissent sur la dynamique.

II. Les procédures d'interface entre ppm3D et le GCM

Un des objectifs du stage était d'implanter la version du code ppm3D dans le modèle LMDZ.3.3. Comme nous l'avons déjà signalé, le listing du schéma provenait du Goddard Space Flight Center, il a donc fallu réaliser une interface entre les 2 GCM.

II.1 Etude des arguments utilisés dans le sous programme ppm3D.F

Le programme d'advection ppm3D permet une grande souplesse d'utilisation. Il travaille en coordonnées hybrides pour la verticale comme le code LMDZ.3.3. En ce qui concerne le maillage, on a le choix entre une grille de type A dans laquelle toutes les variables sont définies au même point et une grille de type C pour laquelle les grandeurs scalaires sont calculées au centre des mailles et les vents aux interfaces. Dans le code LMDZ.3.3, on utilise une grille C. Enfin au niveau des pôles, on peut choisir de les représenter par 1 ou 2 mailles. En ce qui concerne les schémas d'advection, on a bien sûr le choix entre les 4 versions de PPM (PPM monotone, semi-monotone, positif défini ou non contraint) mais on peut également obtenir MUSCL (qui est en fait un cas dégénéré de parabole). L'avantage est que la structure de flux splitting permet un choix indépendant du schéma suivant les 3 directions.

Nous avons donc recensé les paramètres d'appel du sous programme et essayé de trouver leur équivalent dans le LMDZ.3.3. Quand il n'y en avait pas nous avons reconstruit la variable manquante. Le lecteur trouvera dans l'annexe 3 le listing du sous programme ppm3D.F avec en commentaire la signification de chaque paramètre d'appel.

II.2 Construction d'une interface d'entrée

Nous devons effectuer plusieurs changements. Tout d'abord, le code ppm3D nécessite la connaissance de la pression de surface $p_s(i,j)$. Celle-ci est définie au point (i,j) comme la force de pesanteur qu'impose la colonne d'air au dessus de la maille divisée par l'aire de la maille. On a donc :

$$P_s(i, j) = \frac{Mg}{S(i, j)}$$

Le code ppm3D.F utilisait ensuite les composantes naturelles du vent dans les 3 directions et pas les flux de masse. Nous avons donc reconstruit le champ de vent (unat,vnat,wnat) à partir des flux de masse disponibles dans le LMDZ.3.3.

Le dernier changement concernait la construction des niveaux verticaux. Dans le GCM américain l'indice $z=1$ correspond au sommet du modèle et $z=nlay+1$ à la surface. Dans le modèle LMDZ.3.3, c'est l'opposé : $z=llm+1$ représente le sommet et $z=1$ la surface. Nous avons alors réalisé une simple inversion en z de toutes les variables utilisées dans ppm3D. Le lecteur trouvera le listing du sous programme interpre.F dans l'annexe 2.

II.3 Construction d'une interface de sortie

La seule chose à faire en sortie était de ré-inverser les niveaux verticaux afin d'être cohérent avec le reste du code LMDZ.3.3. Le seul champ de sortie utile est le champ q du traceur. Il a également fallu prévoir une procédure de bouclage en longitude pour les traceurs car elle n'existait pas dans ppm3D.F. Le listing du sous programme interpost.F est disponible dans l'annexe 2 .

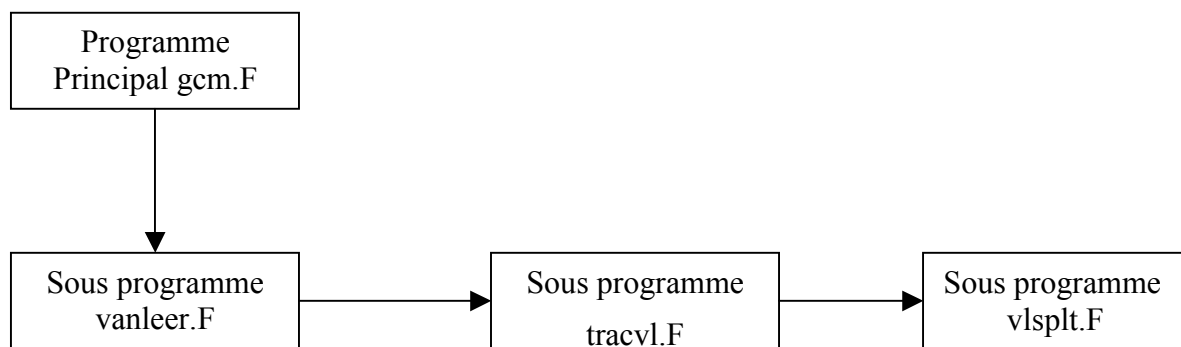
II.4 Traitement des pôles

Les pôles sont représentés chacun par iim points en longitude. Pourtant en réalité, ce n'est qu'un point unique. Il a donc fallu imposer une valeur unique du traceur aux pôles. Elle a été calculée comme la moyenne des valeurs obtenus en chacun des centres de maille de la planisphère au niveau du pôle considéré (boucle en longitude), le tout pondéré par la masse des mailles. Ce traitement est réalisé par le sous programme traceurpole.F, on peut consulter son listing dans l'annexe 2.

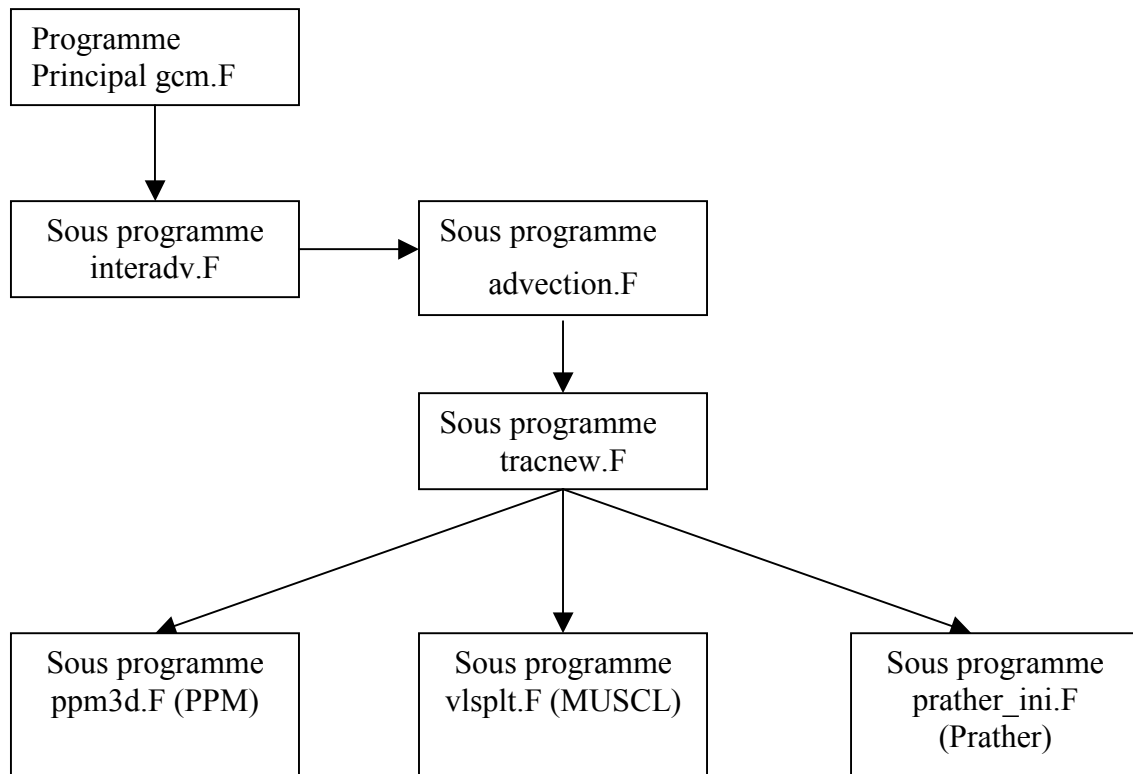
III. Changement d'architecture pour le GCM LMDZ.3.3

Nous avons dû réorganiser les sous programmes gérant l'advection dans le GCM. En effet, avant toute modification, le code ne permettait que l'utilisation efficace du schéma MUSCL (Van Leer I). Afin de pouvoir utiliser de nouveaux schémas (réactiver Prather, implanter ppm3D), il a fallu revoir l'organisation.

Auparavant le programme principal gcm.F appelait le sous programme vanleer.F qui calculait le numéro du premier traceur traité par Van Leer. Le sous programme tracvl permettait de calculer les flux de masse horizontaux puis appelait pour tous les traceurs, le sous programme d'advection par la méthode de Van Leer :vlsplt.F .



La nouvelle architecture devait permettre l'appel simple et pratique aux différents schémas d'advection. Nous avons ajouté un sous programme tracnew.F qui permet suivant la valeur du paramètre iadv(iq), de choisir un schéma d'advection différent (iadv) pour chaque traceur (iq). Cette manipulation permet de s'adapter aux exigences de précision voulue pour le traceur (iadv(iq)). Nous avons abouti au résultat suivant :



IV. Les problèmes liés au pas de temps dans l'advection

Actuellement dans le LMDZ.3.3, on somme les flux de masse suivant x et y pendant 5 pas de temps physique et l'on advecte ensuite la masse correspondante avec le schéma MUSCL. En conservant cette configuration, nous avons constaté que les schémas Prather et PPM donnaient assez rapidement des résultats incohérents. Typiquement au bout d'une trentaine de jours, la solution explosait. Ce mauvais comportement des schémas à des nombres de CFL élevés avait également été aperçu lors du test 2D de l'advection transpolaire. En fait, de manière générale, les schémas d'ordre élevé nécessitent l'emploi de pas de temps petits pour rester stable, il semble donc que pour eux on advecte ici une quantité trop grande de traceur. Un traitement spécial avait été apporté lors du codage de MUSCL dans le code LMDZ.3.3 pour assurer la stabilité du schéma même dans ces conditions extrêmes. Les effets d'une telle procédure s'étaient traduits par une robustesse lors de l'advection transpolaire. Malheureusement celle-ci n'était pas facilement adaptable à PPM ou à Prather.

Pour résoudre ce problème, nous avons 2 alternatives. Le plus simple était d'imposer au code d'advecter tous les pas de temps physique au lieu de tous les 5. Il suffisait pour cela de mettre la variable iapp_tracvl à 1 dans le programme gcm.F. Ceci présente l'inconvénient majeur d'imposer que l'advection se fasse après chaque pas de temps, ce qui n'est pas

forcément nécessaire. En fait, il serait plus judicieux de raisonner en terme de condition de CFL et de choisir le pas de temps d'advection afin que la valeur du nombre de courant reste toujours inférieure à 1 et ceux pour toutes les mailles de la sphère et dans les 3 directions. Dans ce cas, on réduit considérablement les possibilités d'explosion du schéma. Il suffit donc de s'assurer que l'on n'adecte jamais une masse d'air plus grande que la masse d'air contenue dans une maille. A priori le test devrait s'effectuer dans les 3 directions, néanmoins les problèmes se présentent souvent pour le flux suivant x.

Nous avons donc proposé une procédure calculant un pas de temps adaptatif dt en fonction du pas de temps dtvr du GCM pour l'advection du flux de masse pbaru dans la direction x :

```

CFLmax=0.5
do j=2,jjm
  do i=1,iim
    do l=1,llm
      if (pbaru(i,j,l).GE.0) then
        if (pbaru(i,j,l)*dtvr/masse(i,j,l).GT.CFLmax) then
          print*, 'On adecte plus que une maille'
          CFLmax=pbaru(i,j,l)*dtvr/masse(i,j,l)
        endif
      else
        if (-pbaru(i,j,l)*dtvr/masse(i,j,l).GT.CFLmax) then
          print*, 'On adecte plus que une maille'
          CFLmax=-pbaru(i,j,l)*dtvr/masse(i,j,l)
        endif
      endif
    enddo
  enddo
enddo
n=int(CFLmax)+1
dt=dtvr/n

```

Pour être cohérent avec le reste du GCM, il faut ensuite appeler n fois le sous programme d'advection ppm3D.F pour reconstituer une advection sur un temps dtvr.

Cette procédure que nous avons appelé adapttdt.F n'est pas spécifique à PPM et peut être utilisée pour d'autres schémas. Nous avons donc adjoint cette procédure au schéma de Prather. Les tests de temps de calcul réalisés pour PPM sont concluants puisqu'un mois de simulation avec une advection tous les pas de temps sans pas de temps adaptatif durait 1 heure, contre 40 minutes avec une advection tous les 5 pas de temps et la structure de pas de temps adaptatif.

En fait, nous aurions pu apporter un raffinement supplémentaire à cette procédure en l'implantant dans la structure de flux splitting de ppm3D.F et en ne rectifiant le pas de temps que pour l'advection suivant x. Néanmoins nous n'avons pas eu le temps d'aboutir dans cette voie. Le gain en temps de calcul pour le schéma PPM est déjà tout de même intéressant (environ 30%).

Chapitre VI

Les tests d'advection 3D : Simulation de la concentration du radon ^{222}Rn avec le code LMDZ.3.3, simulation de l'advection d'ozone à la tropopause avec le code LMDZ.3.3/INCA

I. Simulation d'un traceur passif : le radon ^{222}Rn

I.1. Description du radon ^{222}Rn

Le radon est un gaz rare inodore et incolore. Il est chimiquement inerte et peu soluble dans l'eau, son lessivage par précipitation est donc négligeable. Son symbole est ^{222}Rn . Il résulte de la désintégration radioactive du radium présent dans la croûte terrestre, il est donc émis par la surface de la Terre ce qui en fait un traceur de masses d'air continentales. A titre d'illustration, le flux de radon au dessus des continents est de 0.7 à 1.3 atomes par cm^2 et par seconde alors qu'il est mille fois inférieur au dessus des océans. Le radon passe du sol à l'atmosphère par diffusion à travers les poches de gaz situées entre les particules du sol, mais seul une fraction de un à 10 s'échappe. L'émission de radon en surface dépend de nombreux paramètres parmi lesquels le type de roches, le type de sol, la température, l'humidité de surface, les taux de pluie enregistrés, la vitesse du vent et la couverture de glace. En effet, la source de radon est inhibée lorsque la surface est gelée.

Dans le modèle, les choses ont été simplifiées puisque tous ces paramètres sont négligés excepté l'influence de la glace. La production de radon par le sol est prise uniforme spatialement (1 atome par cm^2 et par seconde) et nulle au dessus des océans et de la glace.

Son principal puit est sa décroissance radioactive en l'atome de plomb avec un temps de demi vie de 3.8 jours ce qui représente une durée typique des aérosols troposphériques. C'est un traceur sensible au transport vertical au dessus des continents puisque sa durée de vie est de l'ordre de grandeur du temps de ventilation de la couche limite. Ainsi, il est tout a fait adapté pour comparer et valider les schémas numériques de transport à grande échelle. Cependant, même si les relevés de stations pour la concentration de radon sur les 10 dernières années sont nombreux, on dispose de peu de profils verticaux.

I.2. Les simulations effectuées

Nous avons réalisé 2 séries de simulations dite *Nudgées*. Dans cette configuration, le modèle est ramené de manière pondérée à chaque pas de temps vers les données en température et en champs de vent de l'European Centre for Medium-Range Weather Forecasts lues toutes les 6 heures.

Pour la 1^{ère} série, nous avons lancé 2 simulations (MUSCL et PPM Monotone) sur toute l'année 2000 avec des sorties bi-journalières en résolution 96x72x19 et avec 5 traceurs (eau liquide, eau gazeuse, radon et plomb plus un traceur fictif)

Quant à la 2^{ème} série, nous avons réalisé 6 simulations du mois de Mai 2000 avec la même résolution et le même nombre de traceurs que précédemment pour MUSCL, PPM, Prather. Pour initialiser les concentrations en traceur, nous avons utilisé les résultats de la

simulation MUSCL fin Avril. Le temps de calcul demandé par le schéma de Prather le rend difficilement utilisable de manière automatique, nous l'avons utilisé uniquement comme référence. Plusieurs cas ont été testés : advection MUSCL dans les 3 directions, advection PPM dans les 3 directions et advection Prather dans les 3 directions.

I.3. Dépouillement des résultats

I.3.1 Les simulations de l'année 2000

En ce qui concerne la 1^{ère} série de simulation, nous disposions des mesures (1 prise par heure) de concentration de radon sur l'année 2000 dans deux stations : la base Martin de Viviers située sur l'île d'Amsterdam (37° de latitude Sud et 77° de longitude Est) et la base de Mace Head située sur la côte Ouest de l'Irlande (53° de latitude Nord 10° de longitude Ouest). Nous avons donc pu superposer les résultats obtenus numériquement et les confronter aux données expérimentales de ces 2 stations. On pouvait donc tester au niveau du sol, les concentrations en radon prédite par le modèle sur 1 an avec en vert le schéma MUSCL et en bleu le schéma PPM Monotone. Les résultats sont donnés à la page suivante, l'unité est le mBq/m³.

Il apparaît clairement que le schéma PPM est moins diffusif que MUSCL, le mois de Juin 2000 sur l'île d'Amsterdam par exemple illustre bien ce fait. Néanmoins la différence entre les 2 schémas nous a semblé assez faible compte tenu notamment du temps de calcul nécessité par PPM. Ainsi à titre d'exemple pour le mois de Décembre 2000, la simulation avec MUSCL a durée 28 min contre 60 min avec PPM pour une advection tous les pas de temps. On a heureusement pu ramener ce temps à 40 min en utilisant la structure de pas de temps adaptatif décrite précédemment.

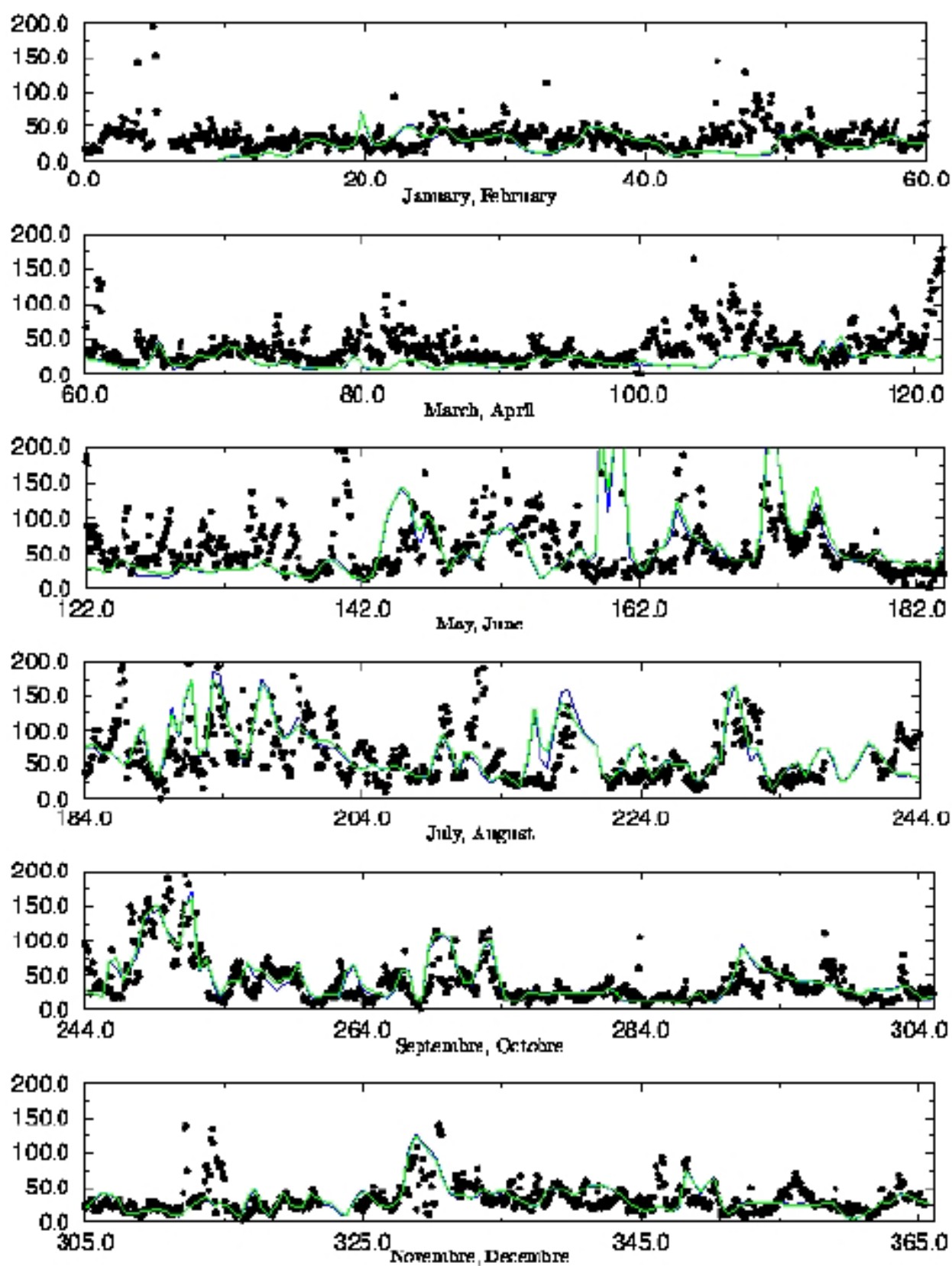


Figure 1: Mesure et simulation du Ra222. Ile d'Amsterdam

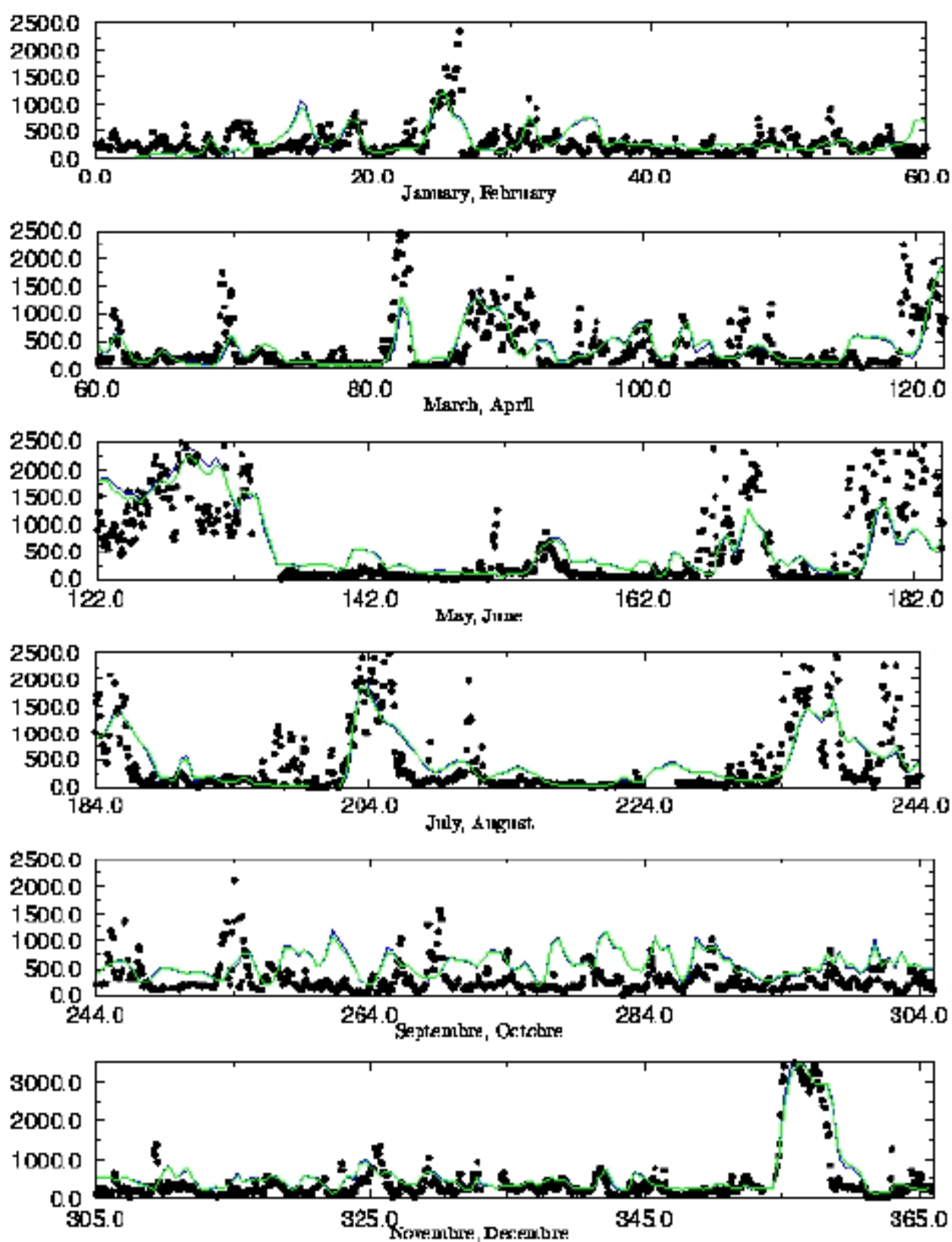


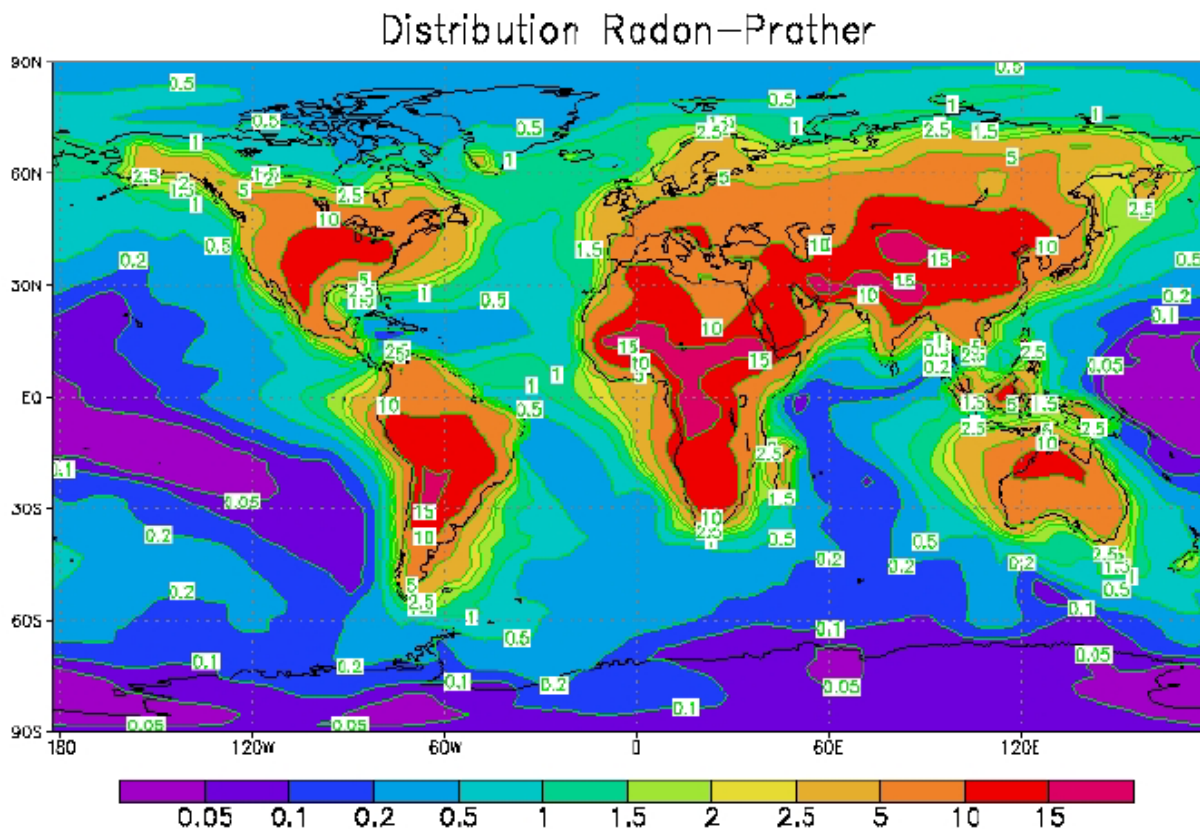
Figure 2: Mesure et simulation du Ra222. MHD

1.3.2 Les simulations du mois de Mai

Pour une simulation 3D, la diffusion numérique d'un schéma peut se voir soit dans le plan (x,y) soit sur la verticale. En ce qui concerne le radon, nous avons choisi de comparer les schémas sur l'horizontale, nous effectuerons les études verticales plus tard avec l'ozone.

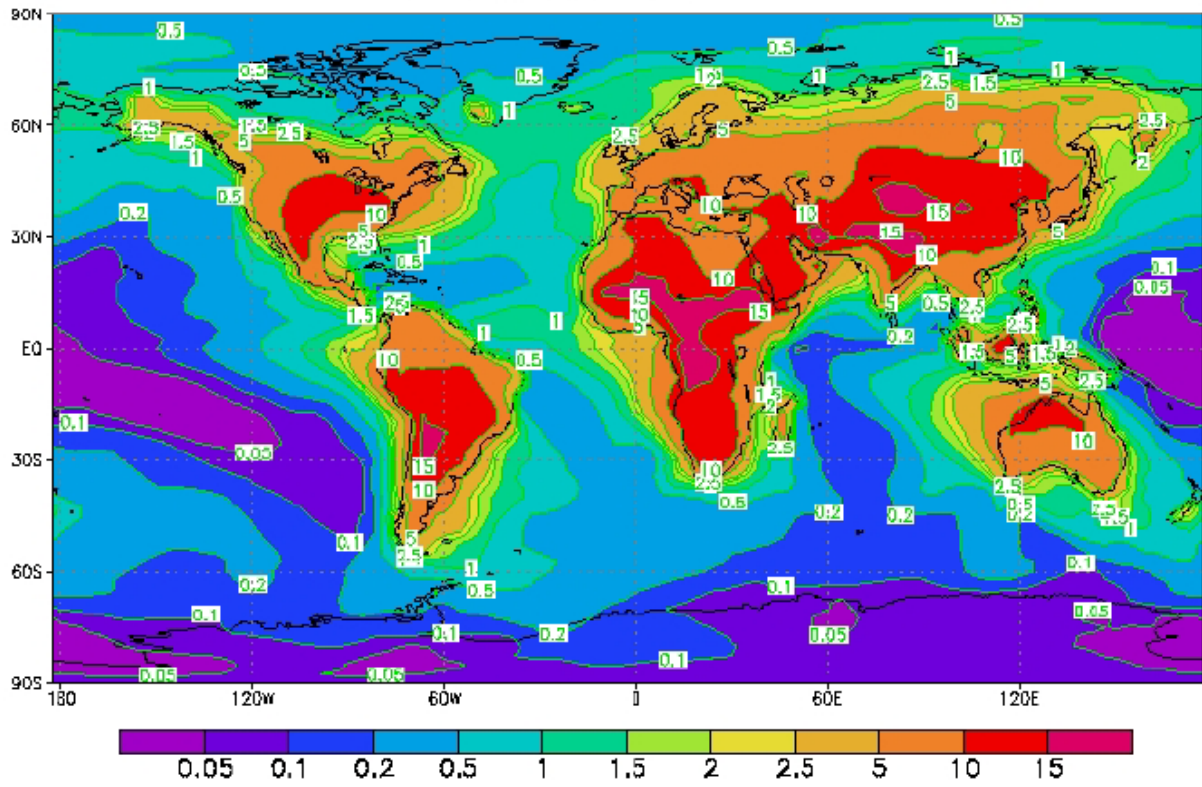
Afin de comparer les différents schémas, nous avons tracé la distribution de radon sur toute la surface du globe au 3^{ème} niveau (environ 950 hPa) moyennée sur les 62 sorties du modèle au mois de mai (2 sorties par jour pendant 31 jours). Les résultats sont à multiplier par 10^5 pour obtenir des valeurs en nombre d'atomes de radon par kg d'air.

Nous sommes partis du fait suivant : un schéma diffusif horizontalement diminue les gradients de radon. Or ces gradients sont particulièrement forts au voisinage des côtes. En effet, le radon se trouve en forte quantité au dessus des continents où il est produit, par contre au milieu des océans sa concentration est uniquement déterminée par la proportion advectée. Ainsi, en observant les littoraux, nous allons pouvoir observer l'impact d'un schéma ou d'un autre.

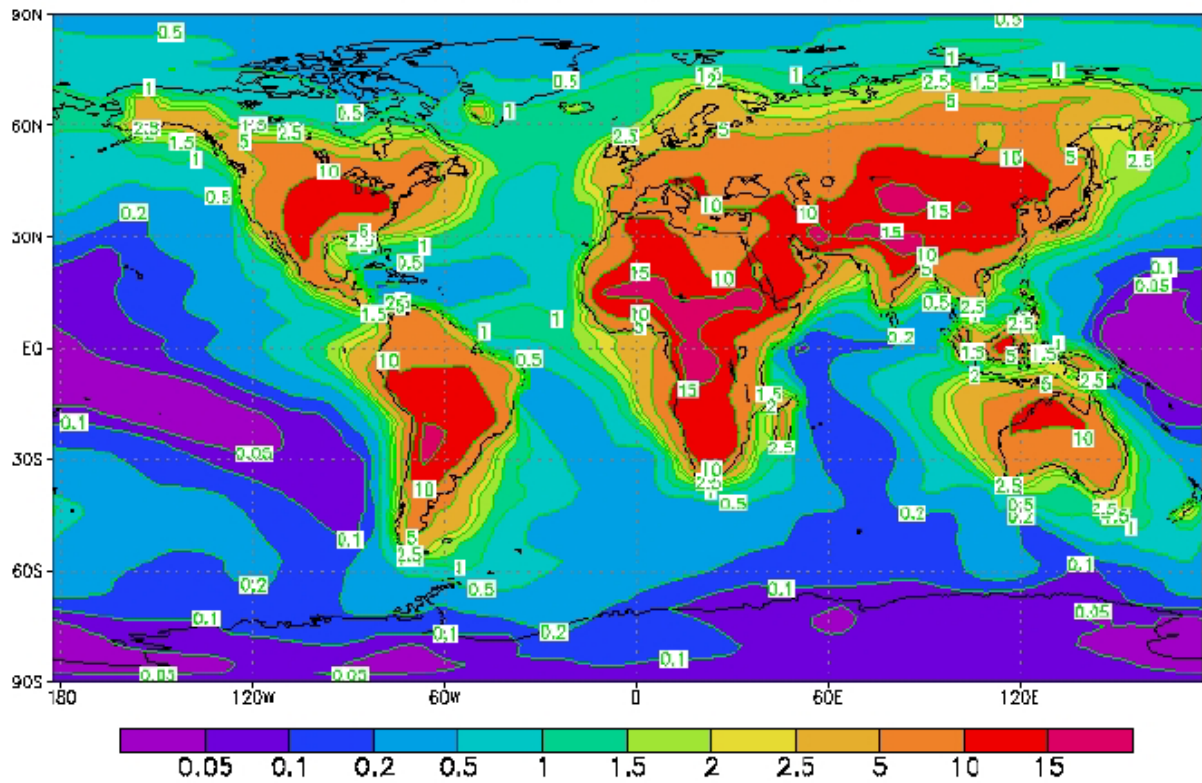


Les 3 résultats possèdent la même structure générale qui correspond à une réalité physique. Les maxima de radon se situent bien au niveau des continents et les minima sont au dessus des océans. Conformément à ce que l'on observe dans la réalité, la concentration de radon est inférieure sur la côte ouest des Etats-Unis que sur la côte est. Les contours obtenus avec Prather et dans certaines régions (côte est de l'Amérique du Sud et Océan Atlantique) avec PPM Monotone sont plus découpés et font apparaître des structures plus fines que MUSCL.

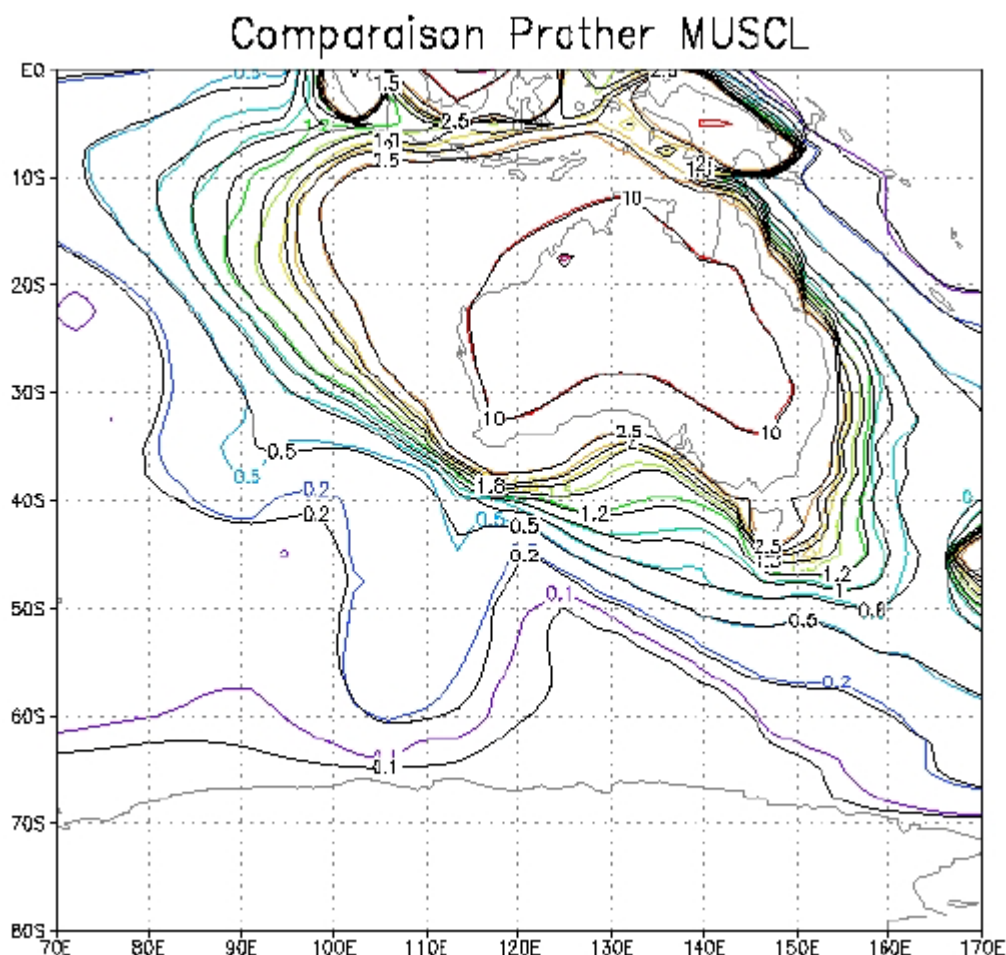
Distribution Radon-PPM



Distribution Radon-MUSCL



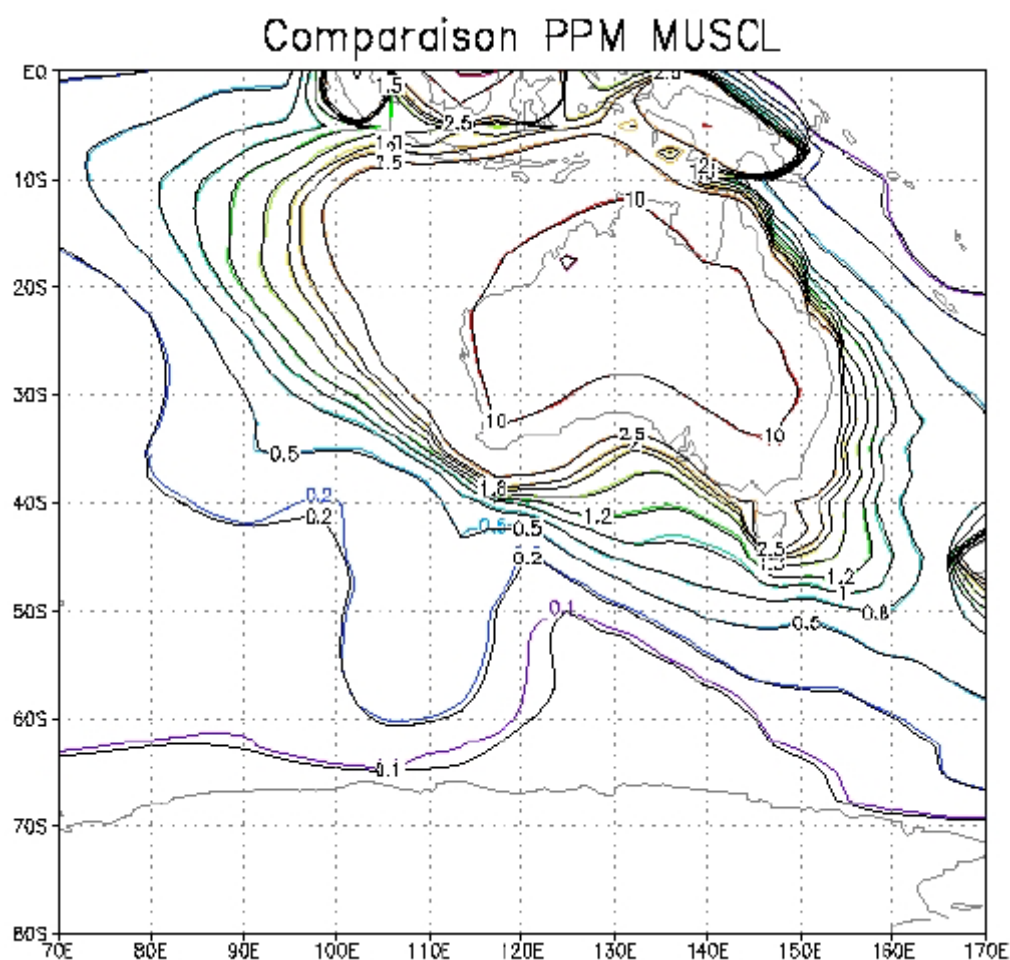
Rentrons à présent dans les détails et observons plus particulièrement les littoraux. Les zones les plus intéressantes semblent se situer le long de la côte est de l'Amérique du Sud, le long de la côte ouest des Etats-Unis et au large de l'Australie. Zoomons par exemple sur l'Australie.



Sur cette figure sont représentés en couleurs les résultats du schéma de Prather et en noir ceux de MUSCL. On discerne bien les différences entre les iso contours suivant le schéma. Avec Prather ceux-ci se rapprochent des côtes ce qui a pour effet de renforcer le gradient de radon. Considérons à présent l'iso contour 0.1, nous voyons sur la carte qu'il existe des zones assez étendues où MUSCL prédit des valeurs (en l'occurrence 0.1) là où Prather est déjà nul. L'erreur dans la distribution qui en résulte est assez importante puisqu'au bout du compte on prédit du radon là où il n'y en a pas, tout cela à cause de la plus grande diffusion numérique du schéma MUSCL. On obtiendrait des résultats toujours en faveur de Prather en le confrontant à PPM Monotone

Dans l'optique d'implanter le schéma PPM dans le modèle LMDZ, confrontons à présent MUSCL et PPM. Dans la figure ci dessous, les résultats de PPM Monotone sont en couleurs et ceux de MUSCL sont en noir. La différence est moins nette qu'avec Prather,

néanmoins elle existe toujours et en faveur de PPM. On observe ainsi une diffusion numérique plus faible avec PPM qu'avec MUSCL au niveau de l'iso contour 0.1 notamment.



En conclusion, ces tests 3D réalistes du transport d'un traceur passif ont permis de prouver qu'en terme d'advection horizontale, le schéma PPM Monotone se comportait mieux que l'actuel schéma MUSCL utilisé dans le modèle LMDZ.3.3. Nous allons à présent poursuivre notre étude en testant l'efficacité de nos différents schémas sur l'advection verticale d'un traceur actif : l'ozone.

II. Simulation d'advection d'un traceur actif : l'ozone O_3

II.1. L'enjeu des simulations d'ozone

La prise en compte des processus photochimiques de l'atmosphère dans le modèle de circulation générale LMDZ a pour objectif d'étudier l'évolution de la composition chimique atmosphérique sous l'effet des activités humaines et son impact sur le climat. L'ozone joue à ce titre un rôle crucial.

Pour l'instant seule la chimie troposphérique de l'ozone est modélisée dans le LMDZ, en ce qui concerne la stratosphère les concentrations d'ozone sont imposées par les climatologies. Au niveau de la troposphère, l'ozone agit sur le climat de deux manières. Tout d'abord, la photolyse de l'ozone dans l'ultraviolet conduit à la production du radical hydroxyle OH. Il joue le rôle d'agent nettoyant de l'atmosphère en réagissant avec la plupart des composés émis par les activités humaines ou par les processus naturels (CO , CH_4 ou des hydrocarbures non méthaniques). Il contrôle ainsi leur durée de vie dans l'atmosphère. De plus, la molécule O_3 participe de façon directe à l'effet de serre. Ceci signifie qu'elle absorbe une partie du rayonnement terrestre et l'émet vers le sol.

La distribution spatiale et temporelle de l'ozone dans la troposphère est contrôlée par 4 processus :

- La production photochimique dans la troposphère qui résulte de l'oxydation du monoxyde de carbone et des hydrocarbures en présence d'oxydes d'azote.
- La destruction photochimique dans la troposphère.
- Le dépôt de sol.
- Les échanges de masse d'air entre la stratosphère et la troposphère.

C'est ce dernier point qui nous intéresse tout particulièrement. La stratosphère contient environ 90% de la quantité totale d'ozone contenue dans l'atmosphère. Il est donc très important de modéliser avec précision les transports verticaux qui contribuent à l'apport d'ozone stratosphérique dans la troposphère.

La zone cruciale à traiter est donc celle qui sépare la troposphère de la stratosphère (située en moyenne à 12km au dessus du sol) et que l'on appelle la **tropopause**. Cette zone agit comme une barrière naturelle pour de nombreux constituants chimiques. Elle provoque ainsi l'apparition de forts gradients verticaux dans la concentration des espèces et notamment d'ozone. On se retrouve dans une situation où il y a beaucoup d'ozone stratosphérique au dessus de la tropopause et peu en dessous. Ce phénomène est associé à une durée de vie de l'ozone dans cette région assez longue (plusieurs mois).

Ainsi, si l'on traite numériquement une zone où la diffusion physique est faible, les résultats obtenus pourront être faussés par la diffusion numérique des schémas. C'est le cas notamment du schéma MUSCL. En effet, il s'avère incapable de traiter avec précision la

variation brutale de la concentration d'ozone à la tropopause. C'est cette remarque qui a motivé le test d'autres schémas.

II.2. Description du module de chimie INCA

Les travaux effectués au cours de l'année 1999 marquèrent le démarrage du projet de couplage du modèle LMDZ (version transport) avec le nouveau module interactif de chimie atmosphérique INCA (module d'INteractions avec la Chimie Atmosphérique) développé par le Service d'Aéronomie (SA).

L'approche retenue dans LMDZ/INCA est le calcul de la photochimie en mode on-line dans le modèle de circulation générale avec un appel au module INCA à chaque pas en temps de la physique du GCM (i.e., 30 min). Cette approche permet un couplage étroit entre les processus chimiques et le climat avec un échange rapide entre les différents modules et une meilleure prise en compte de la variabilité temporelle des processus et grandeurs physiques. Les objectifs visés avec la chaîne LMDZ/INCA sont:

- La prise en compte des gaz à effet de serre dans le calcul des forçages radiatifs et des perturbations du climat dans le GCM LMDZ. Cette version doit permettre des intégrations longues du GCM (plusieurs dizaines-centaines d'années d'évolution) et une prise en compte réaliste de la distribution des principaux gaz radioactivement actifs (i.e., CH₄, N₂O, composés halogénés, ozone).
- Le calcul interactif dans le GCM de la chimie de l'ozone dans la troposphère et des principaux oxydants (i.e., OH, H₂O₂, NO₃) avec une chimie d'oxydation du méthane et/ou une prise en compte plus détaillée de la chimie des composés organiques volatiles (COV) dans une version ultérieure. Cette version permettra l'étude des interactions existant entre la chimie et le climat mais également une étude plus détaillée de la formation des polluants et pourra être combinée avec la version de LMDZ contrainte par les analyses du ECMWF (simulation nudgée) et zoomée sur une région de mesures.
- La prise en compte simultanée de la chimie de l'ozone dans la troposphère et la stratosphère pour l'étude du bilan de l'ozone, de son évolution et impact sur le climat dans la version de LMDZ à 19 niveaux verticaux.
- Par ailleurs, les travaux sont menés en parallèle entre chimie gazeuse et chimie des aérosols pour à terme prendre en compte la chimie hétérogène dans le modèle et converger vers une même version.

La version 1.0 standard du module INCA permet de simuler la distribution et l'évolution de 25 traceurs. En particulier, les principaux gaz à effet de serre de longue durée de vie (i.e., CH₄, N₂O, 13 espèces halogénées incluant CH₃CCl₃, les principaux CFC, HCFC, et halons) et de plusieurs traceurs radioactifs permettent la validation du transport convectif, des échanges troposphère-stratosphère ou interhémisphériques. Cette version 1.0 permet de calculer la distribution des gaz à effet de serre dans la troposphère, de valider les échanges troposphère-stratosphère à partir des distributions calculées de ces espèces dans la stratosphère (e.g., CH₄, N₂O, CFC, traceur ozone inerte), de calculer la source stratosphérique de NO_x, et de calculer le contenu en chlore et en brome dans la stratosphère. La variation

saisonnière est maintenant prise en compte de manière réaliste dans le modèle et inclut le trou d'ozone antarctique.

La version 2.0 du module est actuellement en développement et prend en compte 40 espèces et une centaine de réactions photochimiques. Cette version permettra le calcul de l'ozone et de ses précurseurs (CH_4 , CO , NO_x) dans la troposphère. Ces simulations sont essentiellement effectuées sur le supercalculateur NEC SX5 de l'IDRIS. Une année de simulation avec 40 traceurs et la chimie de l'ozone requiert environ 16 heures de CPU contre 4 heures pour 4 traceurs sans chimie. Près de 30% du temps de calcul sont dédiés au transport des traceurs et environ 20% à la chimie proprement dite.

II.3. Les simulations effectuées

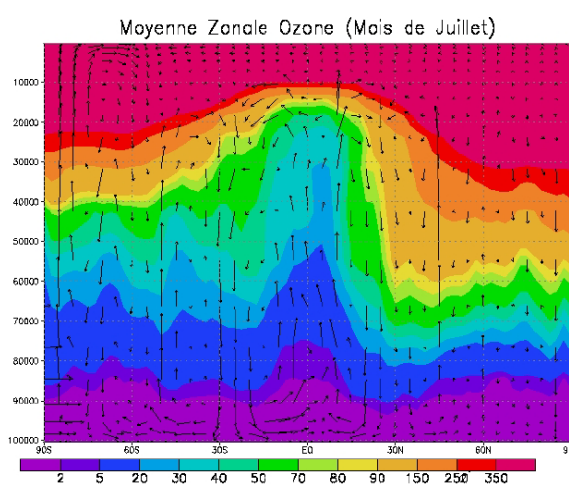
Pour l'ozone, nous avons décidé de lancer des simulations sur les 22 premiers jours du mois de juillet (pour l'hémisphère Nord) avec une résolution classique $96 \times 72 \times 19$ et 12 traceurs ozone. Les schémas testés sont PPM Monotone, MUSCL et Prather. Les quantités d'ozone produites dans la stratosphère sont données par des climatologies. Nous avons utilisé celle de Li et Shine [6] qui combine des données satellites et des observations par sonde. Pour éviter d'avoir des temps de calcul trop longs, nous n'avons considéré que de l'ozone inerte chimiquement. Ainsi le seul puit d'ozone est son dépôt dans le sol, pour celui-ci on prend une vitesse de 0.20 cm/s au dessus des continents et de 0.02 cm/s au dessus des océans entre 70° Sud et 70° Nord, en dehors de cette bande de latitude la vitesse vaut de 0.02 cm/s.

II.4. Dépouillement des résultats

II.4.1. Les explications physiques

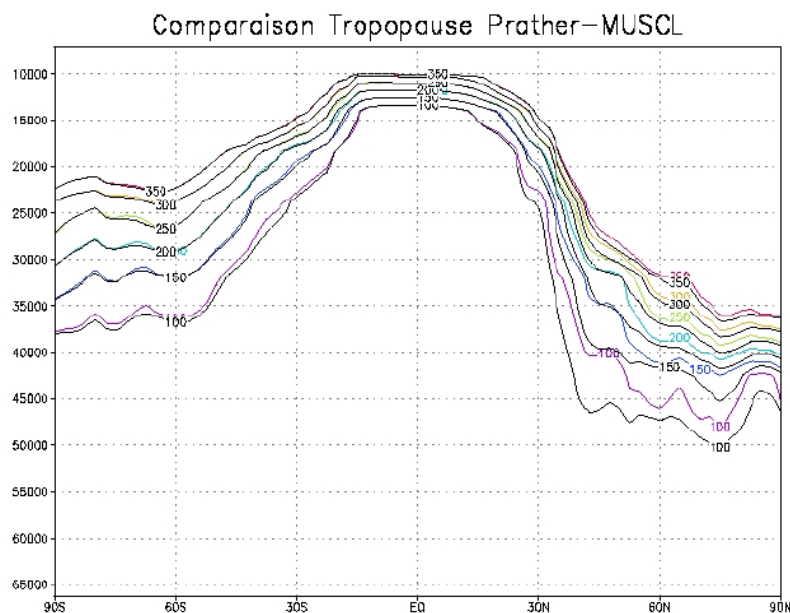
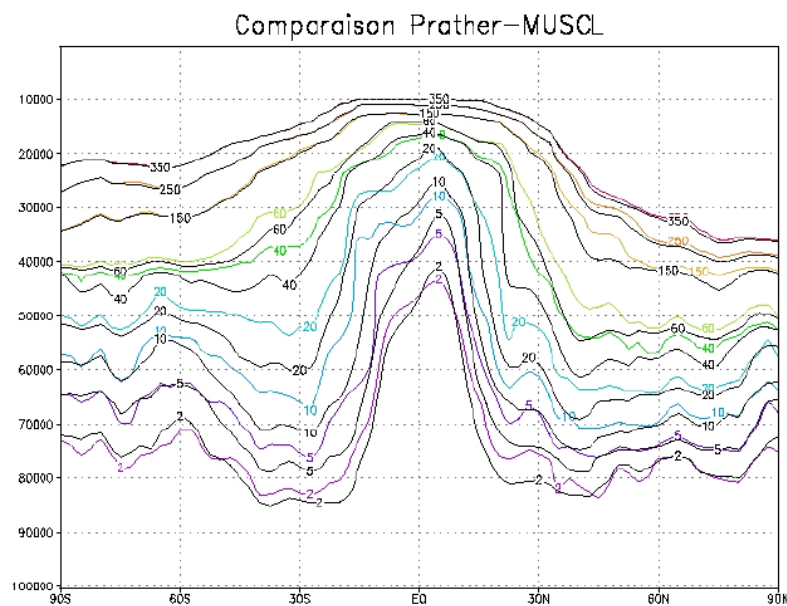
Pour expliquer les phénomènes qui se produisent, nous nous sommes servis des moyennes zonales des concentrations en ozone pour les 3 schémas Prather, PPM et MUSCL. La moyenne zonale représente la valeur moyennée du traceur sur toutes les longitudes, on la représente avec en ordonnée la verticale (niveau de pression) et en abscisse la latitude. Nous avons représenté les résultats obtenus avec Prather au 20^{ème} jour et sur cette figure nous avons ajouté la circulation des masses d'air. L'unité employée est le ppb.

On voit bien les mouvements verticaux de masse d'air et les cellules de Hadley. En effet, les masses d'air montent au niveau du front intertropical et du front polaire et redescendent au niveau des hautes pressions subtropicales et des pôles. On peut remarquer notamment que le profil est dissymétrique, les concentrations d'ozone dans la troposphère à une altitude donnée sont plus importantes dans l'hémisphère Nord que dans l'hémisphère Sud. Ceci est tout à fait normal puisqu'on simule un mois d'été pour l'hémisphère Nord.

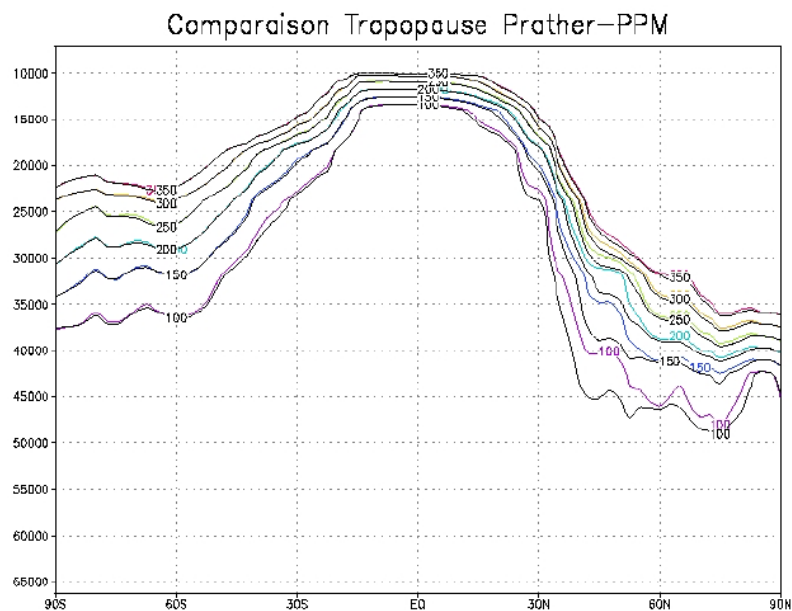
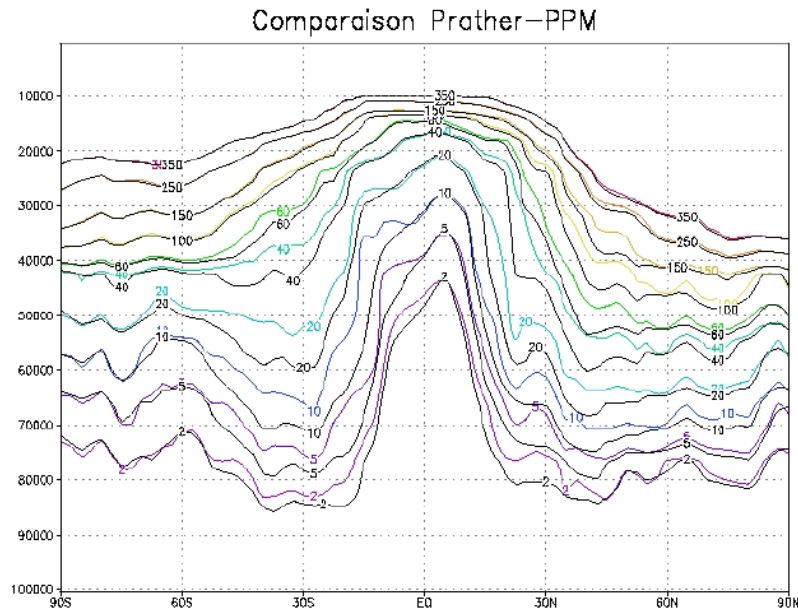


II.4.2. Les comparaisons avec Prather

Tout le problème était ensuite de localiser la tropopause. Nous savons que cette frontière entre la troposphère et la stratosphère est marquée par de forts gradients d'ozone. Nous nous sommes donc servi des résultats références fournis par le schéma de Prather, pour la découvrir. Nous avons ensuite pu comparer nos 3 schémas d'advections. Nous nous sommes cette fois placé au 6^{ème} jour de simulation et nous avons tracé les moyennes zonales. Les résultats pour Prather sont en couleurs ceux pour PPM/MUSCL sont en noir. L'unité utilisée est le ppb. Voici tout d'abord les comparaisons Prather/MUSCL :



Comparons ensuite les schémas Prather et PPM Monotone :



Il faut séparer deux études : celle de la circulation globale du traceur et celle de l'advection à la tropopause.

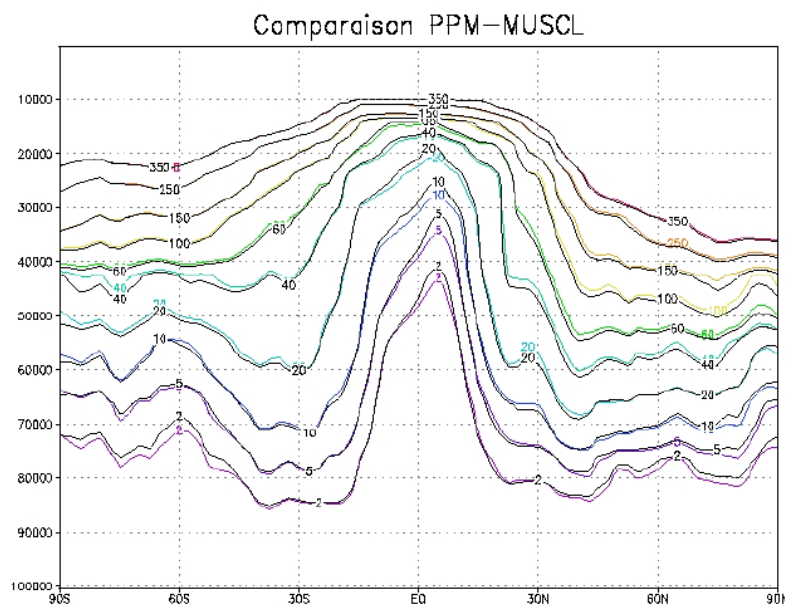
Commençons par regarder les choses de manière globale. Intéressons nous d'abord aux zones s'étalant de part et d'autre de la cheminée centrale (zone entre 25°S et 25°N). On constate le très bon comportement du schéma de Prather surtout au niveau des grands

courants d'air descendants, i.e les zones subtropicales. En effet, les contours donnés par Prather se situent toujours au dessus de ceux de MUSCL ou PPM. Ceci caractérise bien le caractère moins diffusif de ce schéma. Au niveau de la cheminée centrale et plus largement aux latitudes où l'air remonte, Prather prédit des concentrations supérieures à MUSCL. A ces endroits, le schéma advecte les faibles valeurs d'ozone qui se situent dans la basse troposphère. Un schéma diffusif aura donc tendance à majorer l'étendue des zones de faibles concentrations, c'est exactement ce que fait MUSCL. Par contre PPM se comporte très bien dans les zones où l'air remonte ($[0,10^{\circ}\text{N}]$ ou $[90^{\circ}\text{S},80^{\circ}\text{S}]$), ses iso contours sont quasiment confondus avec ceux de Prather.

Intéressons nous à présent à ce qui se passe au niveau de la frontière troposphère-stratosphère. On voit tout d'abord très bien que les iso contours se resserrent avec le schéma de Prather, ce qui a pour effet de renforcer le gradient d'ozone à la tropopause. La position des lignes (Prather au dessus de MUSCL et au dessus de PPM) favorisent toujours ce schéma ce qui signifie bien que l'advection par Prather prédit à la traversée de la tropopause (dans un sens comme dans l'autre) des quantités d'ozone inférieures.

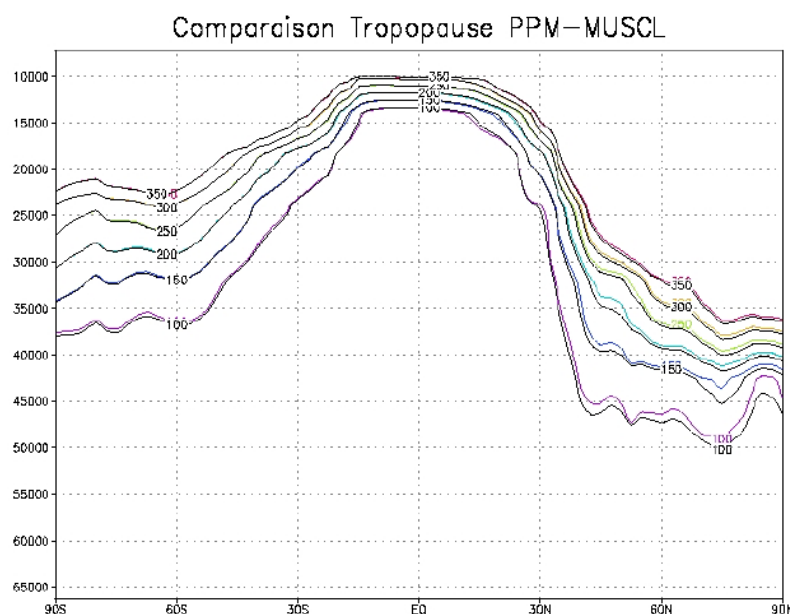
II.4.3. La comparaison entre PPM et MUSCL

Comparons ensuite les schémas MUSCL et PPM Monotone. Les contours en couleurs sont ceux de PPM et les noirs ceux de MUSCL.



Considérons d'abord les zones où l'air descend de part et d'autre de la cheminée centrale. Le schéma PPM semble meilleur du sommet jusqu'à des altitudes moyennes correspondant à des pressions de l'ordre de 75000 Pa. Ensuite la tendance s'inverse. Néanmoins, l'erreur de PPM s'effectue alors sur des valeurs relativement faibles d'ozone, ce n'est donc pas très grave. Dans la région équatoriale où l'air remonte, on remarque un meilleur comportement de PPM, puisque celui prédit des zones de faibles concentrations moins étendues que MUSCL. Répétons une fois encore que si l'on reprend la figure de

comparaison Prather-PPM du chapitre précédent, on s'aperçoit même que dans cette zone les contours de Prather et de PPM sont confondus !



Les résultats obtenus à la tropopause sont assez convaincants. Commençons par l'hémisphère Nord. Globalement, à partir de 30° de latitude, l'advection est mieux traitée avec le schéma PPM Monotone. Les iso contours PPM sont en effet situés au dessus des iso contours du schéma MUSCL ce qui signifie que PPM prédit une quantité d'ozone inférieure au passage de la tropopause, on constate également un rapprochement des courbes ce qui est bénéfique. Dans l'hémisphère Sud, les 2 schémas se comportent de la même manière et en se rapprochant du pôle PPM semble être un peu meilleur. Enfin dans la zone centrale, on constate comme dans le cas Prather comparé à MUSCL que les iso contours sont quasi-confondus.

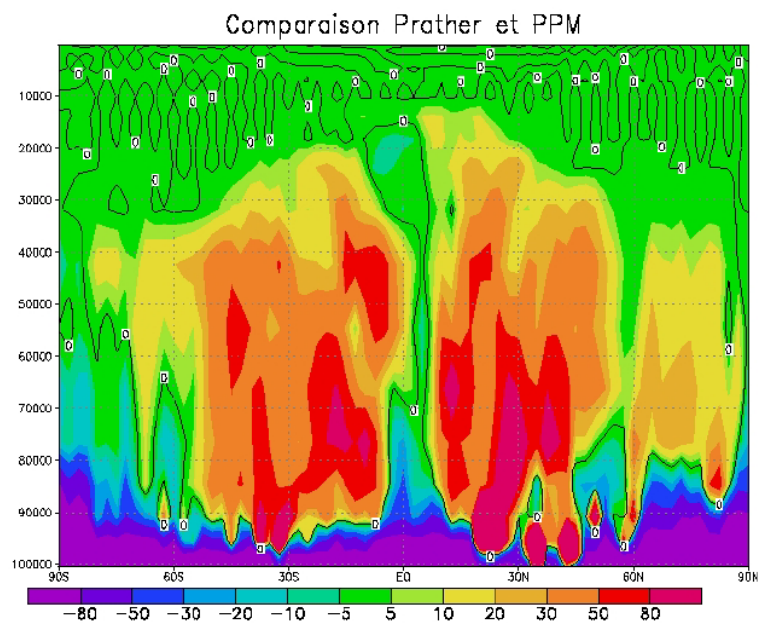
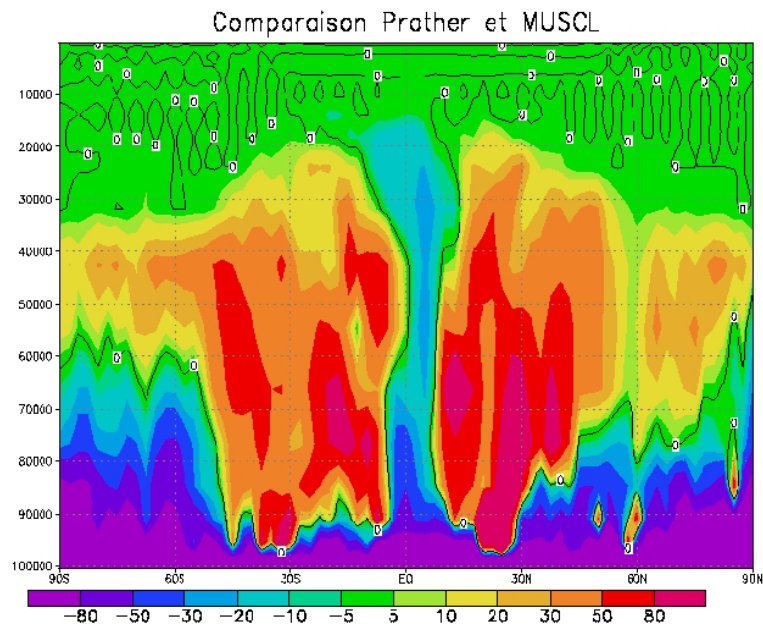
II.4.4. Estimation des gains

Pour estimer les gains, nous allons raisonner en prenant comme référence les résultats du schéma de Prather et en calculant la quantité suivante :

$$\vartheta(\%) = \text{Moyenne Zonale} \left(\frac{\text{schéma X} - \text{schéma Prather}}{\text{schéma Prather}} \right)$$

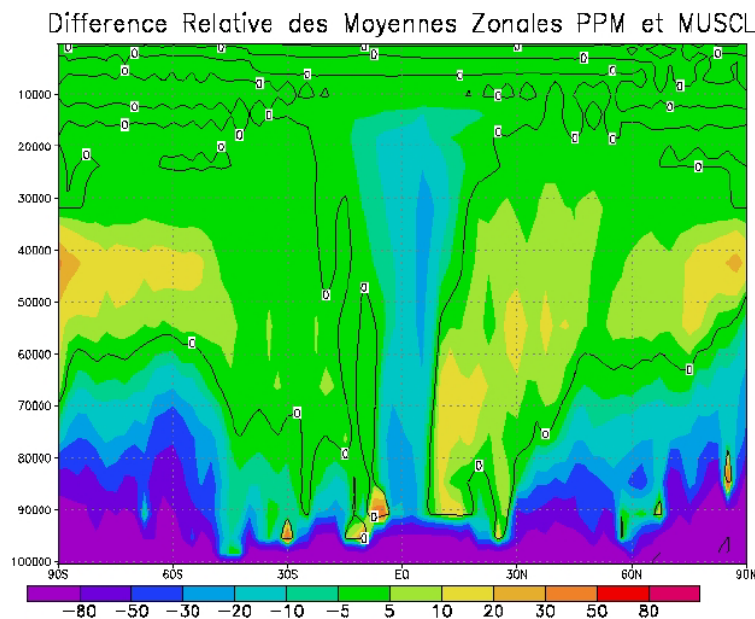
Tout d'abord, ces deux figures permettent de mettre à jour un léger problème. En effet Prather et PPM Monotone prédisent près de la surface des quantités bien supérieures à celles de MUSCL (80% et plus). Ceci n'est pas normal et nous n'avons pas réussi à savoir d'où cela provenait. Néanmoins les valeurs mises en jeu dans la basse troposphère sont assez faibles ce qui relativise ces erreurs.

Par contre, les figures permettent de voir les zones où la perte par rapport à Prather est faible ou forte et aussi les zones où PPM donne de meilleurs résultats que MUSCL.



Considérons tout d'abord les zones où l'air remonte (i.e la cheminée équatoriale et la zone légèrement au nord du pôle Sud). Là, le schéma PPM est nettement plus efficace que MUSCL. Par exemple, près de l'équateur, l'erreur par rapport à Prather ne s'étale que de 0 à 10% alors qu'avec MUSCL on pouvait atteindre les 30%. Dans les endroits où l'air redescend, la conclusion reste la même : les zones de fortes différences (de 20 à 100 %) sont

moins étendues avec PPM qu'avec MUSCL. Comparons à présent directement les schémas MUSCL et PPM.



Le gain est moins spectaculaire qu'entre Prather et MUSCL mais il existe encore de manière assez nette.

Il s'étale entre 0 et 30 % que ce soit dans les zones d'air ascendantes ou descendantes. Au niveau de l'équateur la zone correspondant à un gain entre 20 et 30% est assez importante ce qui corrobore les bon résultats de PPM aux endroits où l'air remonte. On remarque aussi un déséquilibre du gain (plus marqué qu'avec Prather) à l'avantage de l'hémisphère nord.

II.4.5. Résultats d'advection mixtes

Pour conclure sur ce cas test 3D d’ozone, il nous a semblé intéressant de voir dans quelle direction l’utilisation du schéma PPM est la plus avantageuse. Pour cela, nous avons lancé des simulations avec des solutions mixtes en choisissant des schémas d’advection différents suivant la direction.

Simulation avec MUSCL horizontal et PPM sur la verticale

Si l'on compare cette simulation à une simulation PPM dans les 3 directions, l'avantage va à l'alternative 3xPPM avec un gain faible de 0 à 5 %. Si l'on compare à présent la même simulation à une simulation MUSCL dans les 3 directions, l'avantage va à l'alternative MUSCL horizontal et PPM sur la verticale avec un gain de 0 à 20 %.

Simulation avec PPM horizontal et MUSCL sur la verticale

Il n'y a aucune différence entre les résultats de cette simulation et ceux d'une simulation avec PPM dans les 3 directions. Si l'on compare la même simulation avec une simulation MUSCL dans les 3 directions, l'avantage va à l'alternative PPM horizontal et MUSCL sur la verticale avec un gain de 0 à 20%.

Enfin la comparaison entre les alternatives MUSCL horizontal PPM sur la verticale et PPM horizontal MUSCL sur la verticale à tourner à l'avantage de la combinaison PPM horizontal et MUSCL vertical (5% environ)

La conclusion majeure à tirer de tous ces tests est que l'apport du schéma PPM Monotone est surtout bénéfique sur l'horizontal. Utiliser ce schéma en plus sur la verticale, n'amène aucune précision supplémentaire quant à la distribution d'ozone à la tropopause. L'alternative la plus efficace en termes de résultats et de temps de calcul est donc PPM horizontal – MUSCL vertical.

Conclusion

Choix d'un schéma d'advection performant pour le modèle de circulation général atmosphérique LMDZ

Nous avons testé dans ce rapport toute une hiérarchie de schémas (MUSCL, SLOPES, PPM, Prather) dans des configurations allant du cas test 1D à des simulations d'advection 3D de traceurs passifs et actifs très réalistes. Comme il était prévisible, le schéma de Prather conservant jusqu'aux moments du 2^{ème} ordre c'est toujours révélé le plus précis. Malheureusement un tel schéma n'est pas à l'heure actuelle envisageable pour une utilisation généralisée. Pour l'instant, le modèle LMDZ utilise exclusivement le schéma MUSCL, qui même s'il n'est pas très précis, présente l'énorme avantage d'éviter toute discussion sur la prise en compte des effets de l'advection ou de la turbulence sur les moments d'ordre 1 ou 2. C'est cette remarque qui nous a poussé à nous intéresser au schéma PPM qui ne nécessite la connaissance que du moment d'ordre 0 comme MUSCL mais qui est néanmoins plus précis.

Les résultats obtenus sont assez positifs. Sur la série de tests 1D et 2D (escargot et rotation solide), le schéma PPM est capable de rivaliser en terme de précision avec SLOPES qui conserve pourtant jusqu'au moment d'ordre 1. PPM a également l'avantage d'être plus rapide. Dans le cadre de simulations de type GCM, l'utilisation de PPM peut nous permettre de gagner sur MUSCL entre 5 et 20% sur la précision de l'advection. Bien entendu on perd en temps de calcul ce que l'on gagne en précision. Néanmoins, nous avons tout fait pour optimiser celui-ci, notamment avec la procédure de pas de temps adaptatif. Ajoutons aussi que l'utilisation d'un schéma d'advection (MUSCL ou PPM) différent suivant la direction peut également être envisagé ce qui permettrait à moindre perte de réduire encore le temps de calcul. A l'heure actuelle, le schéma PPM (Piecwise Parabolic Method) nous semble donc être un assez bon compromis entre temps de calcul et précision pour des applications de GCM classiques. En effet, nous sommes dans une période où la puissance des ordinateurs permet d'aller au delà d'un schéma du 2^{ème} ordre comme MUSCL même si Prather reste encore inabordable.

Liste des figures

Figure page 9 : Interface physique dynamique dans le modèle LMDZ.

Figure page 10 : La grille physique et la grille scalaire dans le modèle LMDZ.

Figure page 22 : Evolution dans le temps d'une distribution de type gaussienne dans le cas test de l'escargot.

Figure page 23 : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas Prather, SLOPES et MUSCL pour la résolution 40x21x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 24 : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas Prather, SLOPES et MUSCL pour la résolution 60x31x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 25 : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas Prather, SLOPES et MUSCL pour la résolution 120x61x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 27 : Résultats du test de la rotation solide dans le cas de l'advection transpolaire pour Prather, SLOPES et MUSCL après 1 tour de Terre pour la résolution 40x21x1 et un CFL de 0.5.

Figure page 32 : Résultats des tests d'advection 1D sur un triangle pour les schémas Prather, SLOPES, MUSCL et PPM. L'advection se fait sur une distance équivalente à 40 points de discrétisation pour des valeurs du CFL allant de 0.2 à 0.9.

Figure page 33 : Résultats des tests d'advection 1D sur une gaussienne pour les schémas Prather, SLOPES, MUSCL et PPM. L'advection se fait sur une distance équivalente à 40 points de discrétisation pour des valeurs du CFL allant de 0.2 à 0.9.

Figure page 34 : Résultats des tests d'advection 1D sur un carré pour les schémas Prather, SLOPES, MUSCL et PPM. L'advection se fait sur une distance équivalente à 40 points de discrétisation pour des valeurs du CFL allant de 0.2 à 0.9.

Figure page 35 : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas PPM monotone, PPM semi-monotone, PPM positif défini et PPM non contraint pour la résolution 40x21x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 36 haut : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas PPM monotone, PPM semi-monotone, PPM positif défini et PPM non contraint pour la résolution 60x31x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 36 bas : Résultats du cas test de l'escargot pour les schémas PPM monotone, PPM semi-monotone, PPM positif défini et PPM non contraint pour la résolution 120x61x1 avec un CFL de 0.5.

Figure page 39 : Résultats du test de la rotation solide dans le cas de l'advection transpolaire pour les schémas PPM monotone, PPM semi-monotone, PPM positif défini et PPM non contraint après 1 tour de Terre pour la résolution 40x21x1 et un CFL de 0.5.

Figure page 46 : Mesure et simulations de concentration en radon sur l'année 2000 dans l'île d'Amsterdam. Les résultats du schéma MUSCL sont en vert, ceux du schéma PPM monotone en bleu.

Figure page 47 : Mesure et simulations de concentration en radon sur l'année 2000 à Mace Head (Irlande). Les résultats du schéma MUSCL sont en vert, ceux du schéma PPM monotone en bleu.

Figure page 48 : Distribution de radon dans la basse troposphère sur toute la surface du globe avec le schéma d'advection Prather. La résolution choisie pour le GCM est 96x72x19. Les conditions initiales sont celles données par le schéma MUSCL fin avril. Les sorties sont moyennées sur les 62 qui comptent le mois de mai.

Figure page 49 haut : Distribution de radon dans la basse troposphère sur toute la surface du globe avec le schéma d'advection PPM monotone. La résolution choisie pour le GCM est 96x72x19. Les conditions initiales sont celles données par le schéma MUSCL fin avril. Les sorties sont moyennées sur les 62 qui comptent le mois de mai.

Figure page 49 bas : Distribution de radon dans la basse troposphère sur toute la surface du globe avec le schéma d'advection MUSCL. La résolution choisie pour le GCM est 96x72x19. Les conditions initiales sont celles données par le schéma MUSCL fin avril. Les sorties sont moyennées sur les 62 qui comptent le mois de mai.

Figure page 50 : Comparaison des iso contours de radon au large de l'Australie avec les schémas Prather et MUSCL. Mise en relief de la diffusion numérique de MUSCL.

Figure page 51 : Comparaison des iso contours de radon au large de l'Australie avec les schémas PPM et MUSCL.

Figure page 54 : Moyenne zonale d'ozone le 20 juillet obtenue avec le schéma d'advection Prather dans une simulation d'un mois en 96x72x19. Représentation des circulations de masse d'air et des cellules de Hadley.

Figure page 55 haut : Comparaison des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales Prather et MUSCL.

Figure page 55 bas : Comparaison à la tropopause des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales Prather et MUSCL.

Figure page 56 haut : Comparaison des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales Prather et PPM monotone.

Figure page 56 bas : Comparaison à la tropopause des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales Prather et PPM monotone.

Figure page 57 : Comparaison des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales MUSCL et PPM monotone.

Figure page 58 : Comparaison à la tropopause des iso contours verticaux obtenues avec les moyennes zonales MUSCL et PPM monotone.

Figure page 59 haut : Différence en pourcentage des moyennes zonales obtenues avec les schémas d'advection Prather et MUSCL.

Figure page 59 bas : Différence en pourcentage des moyennes zonales obtenues avec les schémas d'advection Prather et PPM monotone.

Figure page 60 : Différence en pourcentage des moyennes zonales obtenues avec les schémas d'advection PPM monotone et MUSCL.

Bibliographie

1. Site internet de l'IPSL : <http://www.ipsl.jussieu.fr>
2. Site internet du LMD : <http://www.lmd.jussieu.fr>
3. Godunov S.K., 1959 : Finite difference methods for the numerical computations of equation of gas dynamics. *Mat. Sb.*, **7**, 271-290.
4. Holton J. R.. An introduction to dynamic meteorology, volume 23 of Internal geophysics series. *Academic Press*, second edition, 1979.
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. *Mon. Wea. Rev.*, **127**, 822-837.
6. Li D. and K.P. Shine : A 4-D Dimensionnal Ozone Climatologie for UGAMP Models, *UGAMP International Report*, N°35, 1995.
7. Lin, S.J., and R. B. Rood, 1996: Multidimensional flux from semi lagrangian transport schemes. *Mon. Wea. Rev.*, **124**, 2046-2070.
8. Prather, M. J., 1986: Numerical advection by conservation of second order moments. *J. Geophys. Res.*, **91**, 6671-6681.
9. Russel, G. L., and J. A. Lerner, 1981: A new finite differencing scheme for the tracer transport equation. *J. Appl. Meteor.*, **20**, 1483-1498.
10. Van Leer B., 1977: Toward the ultimate conservative difference scheme, Part IV: A new approach to numerical convection. *J. Comput. Phys.*, **23**, 276-299.
11. Van Leer B., 1979: Toward the ultimate conservative difference scheme, Part V: A second order sequel to Godunov's method. *J. Comput. Phys.*, **32**, 101-136.
12. Woodward, P. R., and P. Colella, 1984: The Piecewise Parabolic Method (PPM) for gas-dynamical simulations. *J. Comput. Phys.*, **54**, 174-201.
13. Woodward, P.R., and R. L. Carpenter, 1990: Application of the piecewise parabolic method (PPM) to meteorological modeling. *Mon. Wea. Rev.*, **118**, 586-612.

Annexe 1

Annexe 2

Annexe 3

Annexe 4