



HAL
open science

Modélisation tridimensionnelle du rayonnement infrarouge atmosphérique utilisant l'approximation en émissivité : application à la formation du brouillard radiatif

Laurent Makke

► **To cite this version:**

Laurent Makke. Modélisation tridimensionnelle du rayonnement infrarouge atmosphérique utilisant l'approximation en émissivité : application à la formation du brouillard radiatif. Ingénierie de l'environnement. Université Paris-Est, 2015. Français. NNT : 2015PESC1061 . tel-01310337

HAL Id: tel-01310337

<https://pastel.hal.science/tel-01310337>

Submitted on 2 May 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITÉ
— PARIS-EST



Thèse de doctorat de l'Université Paris-Est

Version soumise aux rapporteurs

Laurent Makké

pour l'obtention du titre de docteur
de l'Université Paris-Est

Spécialité : Sciences, Ingénierie et Environnement

Modélisation 3-D du rayonnement atmosphérique infrarouge utilisant l'approche en émissivité : application à l'étude du brouillard radiatif

Jury composé de

D ^r Anthony B. Davis	JPL/NASA, CalTech	rapporteur
P ^r Richard Fournier	Laplace, Université Toulouse III	rapporteur
D ^r Céline Cornet	LOA, Université Lille 1	examinateur
D ^r Maya Milliez	EDF	co-encadrant
D ^r Pierre Plion	EDF	co-encadrant
D ^r Luc Musson-Genon	CEREA, École des Ponts ParisTech	co-encadrant
D ^r Bertrand Carissimo	CEREA, École des Ponts ParisTech	directeur
P ^r Jean-P. Gastellu-Etchegorry	CESBIO, Université Toulouse III	président du jury

*À Charles et Laure,
À Benoît,
À Rania,
À Eden*

Remerciements

Voici une page qu'on se garderait bien de tourner ... tant il est difficile de clore ce chapitre de ma vie.

Je remercie Anthony Davis et Richard Fournier d'avoir accepté de rapporter cette thèse. J'en suis très honoré. Merci pour vos remarques, vos critiques, vos suggestions, vos conseils et ce travail considérable. Merci infiniment.

Je remercie également Céline Cornet et Jean-Philippe Gastellu-Etchegorry en qualité d'examineur et de président du jury. Merci très sincèrement.

Je tiens à remercier Christian Seigneur, directeur du CEREА, de m'avoir accueilli au sein du laboratoire et pour ses traits d'esprit lors des conseils de laboratoire. Ce fût un réel plaisir d'officier au sein du CEREА, et ce grâce également à Véronique Dehlinger.

Je tiens à remercier EDF R&D, et plus particulièrement, l'ensemble du département MFEE pour l'accueil chaleureux dont j'ai pu bénéficier durant ma thèse. Merci à Laurent Martin de m'avoir accueilli au sein du groupe I88 et pour les nombreux échanges et les conseils qu'il a pu me prodiguer. Un grand merci à Chantal Verger et Anne Peuré.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude et ma reconnaissance à Luc Musson-Genon et Pierre Plion de m'avoir suivi avec attention, encadré avec bienveillance et guidé jusqu'à la fin de la thèse et encore aujourd'hui. Je ne saurais comment vous remercier pour tout ce que vous m'avez apporté.

Merci à Bertrand Carissimo d'avoir dirigé mes travaux de thèse et à Maya Milliez d'avoir encadré cette thèse.

Merci aux membres du CEREА et plus particulièrement à Charbel pour son aide précieuse et sa disponibilité, à Vivien pour les parties d'échecs nocturnes.

Merci à Cécile Blanchemanche de l'École Doctorale SIE.

Merci à l'ensemble des collègues du groupe I88 à Chatou City. Cédric pour ces deux années durant lesquelles j'ai partagé ton bureau, ta musique, mes états d'âmes et parfois même quelques ronflements; Julien, pour mille et une... choses; Yannick, pour tout; Raphael, pour les cours de tennis et d'optimisation dans ton bureau; Lu-

cie, pour ta patience et ton écoute (Julien, Cédric et Yannick c'est valable pour vous aussi!); Amélie, pour ton soutien indéfectible; Christophe (Le digne successeur de Laurent Blanc); Yassine, pour ta générosité et ta bonne humeur; Vincent, pour ton muffin au chocolat; Stéphanie, Marie, Paulo, Sébastien (merci pour les sandwiches homemade!) Laurent, Sylvie, Nicolas, Éric D&G, Evelyne, Denis, Guillaume, Dominique, Xiao et Ali.

Merci à Alexandre Douce pour tout le temps qu'il m'aura consacré durant mon stage et ma thèse. Merci infiniment.

Merci à Thomas Pasutto pour tout; le stage, la thèse, les questions métaphysiques, existentielles et spirituelles sur la science et les mathématiques.

Merci à Sofiane Benhamadouche.

Merci à Martin Ferrand, Erwan Lecoupanec, Cyril Baudry et Yvan Fournier pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux, leur disponibilité et leur aide.

Merci à Dominique Laurence.

Merci à Nasser, Bruno, Benoît DLDM, Cédric F., Antoine, Alain B&M, Amélie, Yohan, Fred, Jeff Deldon, Charles, Christophe P&L, Aurélien, Fadila, Thomas, Michael, Jorge, Bertrand, Pierre C, Xavier, Jeff, David, Eric DM, Mathieu G, Stéphane et toutes les personnes que j'ai pu côtoyer durant quatre années.

Merci à Audilenz, Hamza, Boris, Quentin, Maud, Élodie, Freddy, Péné Amine, Benjamin, Thibaud, Romain, Arnaud, Joseph et tout le « gang des lyonnais » pour leur soutien.

Merci à Mickael, Pierre et Franck mon coloc', mon cuisto préféré, grâce à qui j'ai pu travailler sereinement pendant les deux dernières années de thèse.

Merci à toi Ali M et longue vie à Keep Motion.

Merci à toi, Rania. Merci de partager ma vie, mes joies et mes peines. Merci pour ta patience, ton soutien, ton affection, ton amour qui m'ont accompagné tout au long de ma thèse et qui m'accompagneront encore de très longues années.

Merci à vous mes très chers parents. Merci à toi Benoît, mon frère et à toi Émilie. Merci à vous qui m'avez donné tant d'amour. Je vous suis éternellement reconnaissant et redevable pour m'avoir permis de réaliser mes projets. Cette thèse est pour toi ma mère, pour ta thèse sur Balzac que tu n'as jamais pu faire (il n'est jamais trop tard!); pour toi mon père, pour ta thèse de doctorat, avec laquelle tu n'as jamais pu travailler; pour toi mon frère qui m'a tant aidé, soutenu, conseillé, surveillé (un peu...) et surtout aimé.

Table des matières

Introduction	3
1 Généralités sur le rayonnement	7
1.1 Définitions des grandeurs radiatives, Lois fondamentales	9
1.1.1 L'Équation des Transferts Radiatifs	9
1.1.2 Les conditions aux limites radiatives atmosphériques	11
1.1.3 Les grandeurs radiatives	12
1.1.4 Les propriétés radiatives atmosphériques	13
1.2 Modélisation des Transferts Radiatifs dans le code de mécanique des fluides <i>Code_Saturne</i>	13
1.2.1 Modélisation 3-D	13
1.2.1.1 L'intégration spatiale	14
1.2.1.2 L'intégration angulaire	16
1.2.2 Modélisation 1-D	18
1.2.2.1 L'approximation « Two-stream » ou à deux flux	19
1.2.2.2 L'approximation diffuse, facteur de diffusivité	21
1.2.2.3 Les conditions aux limites radiatives	23
1.2.2.4 L'intégration sur le spectre - modèle en émissivité	23
2 Modélisation tridimensionnelle du rayonnement infrarouge	27
2.1 État de l'art sur la résolution 3-D de l'ETR	29
2.1.1 Méthode de Monte Carlo	29
2.1.2 Méthode des Volumes Finis	30
2.1.3 Méthode des Transferts Discrets	30
2.1.4 Méthode des Ordonnées Discrètes	30
2.1.5 Le choix de la méthode des ordonnées discrètes	30
2.2 Les méthodes de quadratures	31
2.2.1 Les quadratures de type S_N	32
2.2.2 Les quadratures de type T_N	33
2.2.3 Les quadratures de type Lebedev-Chebyshev LC_N	34
2.2.4 Les quadratures de type « Double Cyclic Triangle » DCT	34
2.3 Validation des quadratures	34
2.3.1 Résultats	35
2.3.1.1 Comparaison avec le cas SELÇUK	35
2.3.1.2 Comparaison avec le cas SAKAMI	46
2.4 Conclusion	50

3	Modélisation de l'absorption infrarouge dans l'atmosphère	51
3.1	Quelques principes physiques qui régissent les phénomènes d'absorption, d'émission et de diffusion	53
3.1.1	Un seul quantum de mécanique quantique pour expliquer.	53
3.2	Les quatre familles de modèles de propriétés radiatives	54
3.2.1	Calculs Raie Par Raie - Line-By-Line Calculations (LBL)	54
3.2.2	Modèle à bandes étroites - Narrow Band Models	54
3.2.3	Modèle à bandes larges - Wide Band Models	55
3.2.4	Modèle à bandes étroites et larges - k-distributions et Correlated K-Distributions	55
3.2.5	Modèles globaux - Full spectrum	56
3.2.6	Modèle gaz gris ou en émissivité - Broadband emissivity-flux scheme	56
3.3	Un modèle en émissivité, certes, mais calibré pour nos applications atmosphériques	57
3.4	Une expression analytique des coefficients d'absorption gris pour la résolution de l'ETR	61
3.5	Quelques remarques sur ce modèle gris	62
4	Vérification et Validation du modèle de propriétés radiatives	65
4.1	Cadre des expériences numériques	67
4.2	L'approximation Cooling-to-Space - Cas du Cooling-to-Space	67
4.2.1	Quelques considérations sur le maillage et la discrétisation verticale	68
4.2.2	Choix de la méthode de calcul du terme source radiatif	69
4.2.3	Condition à la limite supérieure radiative	70
4.2.4	Sensibilité à la méthode de quadrature	72
4.3	Cas où la T_{sol} est différente de la T_{air} ; vérification des fonctions d'émissivité pour les 3 principaux gaz à effet de serre	77
4.4	Comparaison avec un modèle correlated-k distribution	80
4.5	Simulations avec des profils atmosphériques réalistes	81
4.5.1	Condition ciel clair	83
4.5.2	Conditions ciel nuageux	85
5	Modélisation couplée entre le rayonnement et la thermodynamique : Application à la modélisation du brouillard radiatif 3-D	93
5.1	Une introduction sur la mécanique des fluides et la thermodynamique du module atmosphérique de <i>Code_Saturne</i>	95
5.1.1	La température potentielle	95
5.1.2	La température potentielle liquide	96
5.1.3	Le contenu total en eau liquide + vapeur	96
5.1.4	Le schéma de condensation	96
5.1.5	L'eau liquide nuageuse et précipitante	97
5.2	ParisFog	97
5.2.1	La campagne de mesure	99
5.2.2	Choix de la POI13 : Cas d'un brouillard radiatif	99
5.3	Validation du couplage dynamique du modèle d'absorption 3-D	99

5.3.1	Cas de la colonne périodique en translation : Comparaison des modèles radiatifs 1-D et 3-D	100
5.3.1.1	Sensibilité à l'initialisation sur l'évolution du contenu en eau liquide (LWC)	101
5.3.1.2	Comparaison de l'évolution des profils du taux de réchauffement	104
5.3.1.3	Comparaison de l'évolution des profils de température	106
5.3.2	Sensibilité à la méthode de quadrature	107
5.3.2.1	Évolution du contenu en eau liquide	107
5.3.2.2	Profils du taux de refroidissement	109
5.3.3	Sensibilité à la fréquence d'appel du module radiatif	111
5.3.3.1	Évolution du contenu en eau liquide	111
5.3.3.2	Évolution des profils de température	111
5.3.3.3	Évolution de la température à 30 mètres	114
5.4	Cas d'étude avec bâtiments	116
5.4.1	Paramètres de la simulation	116
5.4.1.1	Construction du maillage	116
5.4.2	Les conditions aux limites radiatives	119
5.4.3	Description qualitative de l'évolution du brouillard	120
5.4.4	Les effets radiatifs 3-D	122
6	Conclusions et Perspectives	125
6.1	Conclusion sur les différents travaux réalisés	126
6.1.1	Transfert thermique par rayonnement dans <i>Code_Saturne</i>	126
6.1.2	Résolution de l'ETR par la méthode des ordonnées discrètes	126
6.1.3	Un nouveau modèle gris pour l'absorption gazeuse dans l'atmosphère	126
6.1.4	Validation de notre paramétrisation	127
6.1.5	Un modèle permettant de capter des effets radiatifs 3-D	127
6.2	Retour sur les quadratures	127
6.3	Retour sur le modèle en gaz gris développé	129
6.3.1	Remarques sur la validité du modèle	129
6.3.2	Remarques sur le potentiel du modèle	130
6.4	Perspectives	130
6.4.1	Temps de calcul et précision	130
6.4.2	L'émissivité du sol	131
6.4.3	L'extension de cette approche au rayonnement solaire	131
6.4.4	La modélisation 3-D d'un cycle de vie complet du brouillard radiatif	132
6.4.5	Comparaisons avec SHDOM et DART	132
Annexes		133
	Comparaison aux observations de ParisFog	133
	Profils de température	133
	Température à 2m et 30m	134
	Flux à 2m et 30m	134
	Formules pour le modèle en émissivité	135
	Fonctions analytiques d'absorption	135

Article soumis	136
Bibliographie	147

Nomenclature

$\epsilon(z', z)$	émissivité de la couche atmosphérique comprise entre z' et z
ϵ_g	émissivité du sol –
ϵ_λ	émissivité monochromatique d'une paroi –
κ	coefficient d'absorption massique
μ	cosinus de l'angle zénithal
ν	fréquence d'onde normée par la célérité de la lumière dans le vide (cm^{-1})
Ω	angle solide (sr)
ϕ	angle azimuthal
ρ	masse volumique ($kg.m^{-3}$)
σ	constante de Stefan ($W.m^{-2}.K^{-4}$)
τ	profondeur optique –
Θ	température potentielle (K)
θ	angle zénithal
Θ_l	température potentielle liquide (K)
\vec{S}	direction de propagation du rayonnement
ξ	chemin optique –
c	célérité de la lumière dans le vide ($m.s^{-1}$)
C_p	capacité calorifique à pression constante ($J.K^{-1}$)
$\mathcal{E}_n(x)$	exponentielle intégrale d'ordre n
F^\downarrow	flux descendant ($W.m^{-2}$)
F_λ^\downarrow	flux monochromatique descendant ($W.m^{-2}.\mu m^{-1}$)
F^\uparrow	flux montant ($W.m^{-2}$)
F_λ^\uparrow	flux monochromatique montant ($W.m^{-2}.\mu m^{-1}$)
F_{net}	flux net sous l'hypothèse plan-parallèle ($W.m^{-2}$)
h	constante de Planck ($m^2.kg.s^{-1}$)

\mathcal{H}	fonction de Heaviside
I	luminance ($W.m^2.sr^{-1}$)
I^\downarrow	luminance descendante ($W.m^2.sr^{-1}$)
I^\uparrow	luminance montante ($W.m^2.sr^{-1}$)
I_λ^o	fonction de Planck ($W.m^2.sr^{-1}.\mu m^{-1}$)
I_λ	luminance monochromatique ($W.m^2.sr^{-1}.\mu m^{-1}$)
k	coefficient d'absorption gris (m^{-1})
k^\downarrow	coefficient d'absorption gris descendant (m^{-1})
k^\uparrow	coefficient d'absorption gris montant (m^{-1})
k_B	constante de Boltzmann ($m^2.kg.s^{-2}.K^{-1}$)
k_λ	coefficient d'absorption monochromatique ($m^{-1}.\mu m^{-1}$)
$k_{\rho\nu}$	mass absorption coefficient ($m^2.kg^{-1}$)
$k_{p\nu}$	pressure absorption coefficient ($s^2.kg^{-1}$)
L_v	chaleur latente d'évaporation ($J.kg^{-1}$)
N_d	nombre de directions discrètes de propagation du rayonnement
p	pression (Pa)
p_o	pression de référence (Pa)
q_l	contenu en eau liquide ($kg.kg^{-1}$)
q_s	contenu en vapeur d'eau à saturation ($kg.kg^{-1}$)
q_v	contenu en vapeur d'eau ($kg.kg^{-1}$)
q_w	contenu total en eau ($kg.kg^{-1}$)
$Q_{\lambda_{inc}}$	flux incident à la paroi ($W.m^{-2}.\mu m^{-1}$)
$Q_{\lambda_{inc}}$	flux incident monochromatique à la paroi ($W.m^{-2}.\mu m^{-1}$)
Q_{net}	flux net ($W.m^{-2}$)
Q_{rad}	densité de flux radiatif ($W.m^{-2}$)
R	constante des gaz parfaits ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)
s	abscisse curviligne
s_p	abscisse curviligne à la paroi
S_{rad}	taux de réchauffement ($W.m^{-3}$)
T	température (K)
\tilde{T}_λ	transmittivité monochromatique diffuse
\mathcal{T}_λ	transmittivité monochromatique
T_A	température de l'atmosphère isotherme (K)
T_g	température du sol (K)
z_{TOP}	altitude maximale du domaine de calcul (m)

Liste des figures

1.1	Représentation de l'angle solide	9
1.2	Liens entre coordonnées cartésiennes, sphériques et optiques dans les équations du rayonnement	19
1.3	Facteur de diffusivité $\frac{1}{\tilde{\mu}}$ en fonction du chemin optique ξ	22
1.4	Figure extraite de Liou (1992) : transmittivité diffuse exacte et calculée pour des facteurs de diffusivité de 1.66 et 2.	23
2.1	Représentation d'un octant pour la quadrature S_4	33
2.2	Représentation d'un octant pour la quadrature T_4	34
2.3	Température du milieu gazeux dans le four parallélépipédique (degrés Celsius) (Douce and Méchitoua, 2004)	36
2.4	Support du profil $x_0 = 0.25$ et $y_0 = 0.25$ pour le terme source radiatif	36
2.5	Support du profil $x_0 = 0.75$ et $y_0 = 0.25$ pour le terme source radiatif	36
2.6	Support du profil $x_0 = 0.75$ et $y_0 = 0.75$ pour le terme source radiatif	37
2.7	Support du profil $x_0 = 1.0$ et $y_0 = 0.25$ pour le flux incident à la paroi	37
2.8	Support du profil $x_0 = 1.0$ et $y_0 = 0.75$ pour le flux incident à la paroi	37
2.9	Maillage de l'enceinte parallélépipédique : 3456 cellules	38
2.10	Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.25$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	38
2.11	Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.75$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	39
2.12	Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.75$ $y_0 = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	39
2.13	Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, faces de bord : $x_0 = 1.0$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	40
2.14	Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, faces de bord : $x_0 = 1$ $y_0 = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	40
2.15	Maillage de l'enceinte cylindrique : 9360 cellules	42
2.16	Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	43

2.17	Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	43
2.18	Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.1.0$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes	44
2.19	Cavité en L	47
2.20	Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et Code_Saturne ; support du profil : $y = 0, z = 0.5; k = 0.5m^{-1}$	47
2.21	Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et Code_Saturne ; support du profil : $y = 0, z = 0.5; k = 1.0m^{-1}$	48
2.22	Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et Code_Saturne ; support du profil : $y = 0, z = 0.5; k = 2.0m^{-1}$	48
2.23	Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et Code_Saturne ; support du profil : $y = 0, z = 0.5; k = 5.0m^{-1}$	49
2.24	Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et Code_Saturne ; support du profil : $y = 0, z = 0.5; k = 10.0m^{-1}$	49
3.1	Spectre des flux montant et descendant ; enveloppe de l'émission du corps noir ; (Ponnulakshmi et al., 2012)	63
	(a) flux montant	63
	(b) flux descedant	63
4.1	3 domaines de simulation de hauteur $1km, 2km, 11km$; conditions aux limites périodiques dans les directions x et $y; \epsilon_g = 1$	68
4.2	Maillage utilisé dans nos simulations, hauteur : $2km, z_{\min} = 2m$	69
4.3	Contenu de vapeur d'eau provenant des mesures de la POI13 à 12h le 18/02/2006	70
4.4	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine : $11km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source semi-analytique et conservatif	71
4.5	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$; vapeur d'eau seulement ; 3 hauteurs de domaine : $11km, 2km, 1km$; Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source semi-analytique	73
4.6	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $11km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	74

4.7	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $2km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	75
4.8	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $1km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	76
4.9	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$; vapeur d'eau seulement ; 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $11km, 2km, 1km$; Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	77
4.10	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$; vapeur d'eau et ses dimères ; 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $11km, 2km, 1km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorptions équivalents, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	78
4.11	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$, vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green) ; Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique	79
4.12	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $1km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD	80
4.13	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $2km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD	81
4.14	Flux descendant (W/m^2) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $1km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD	82
4.15	Flux descendant (W/m^2) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $2km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD	83

4.16	Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme pour différentes valeurs de température de l'atmosphère isotherme calculés avec le code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris ; terme source semi-analytique ; $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $11km$	84
4.17	Profil de température à 18h, 21h, 00h, 03h et 06h sur les 1000 premiers mètres	85
4.18	Taux de réchauffement (K/Day) à 18h, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green) ; 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $11km, 2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique ; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité	86
4.19	Taux de réchauffement (K/Day) à 21h, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green) ; 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique ; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité	87
4.20	Taux de réchauffement (K/Day) à 00h, profil d'eau liquide, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green) ; 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique ; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité	88
4.21	Taux de réchauffement (K/Day) à 03h, profil d'eau liquide, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green) ; 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique ; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité	89
5.1	Liste des instruments déployés durant ParisFog, paramètres pouvant être retrouvés à partir des mesures, gamme mesurée par les instruments et résolution, et type d'opération (RT : opérations de routine ; IOP : période d'observation intensives) ; (Haeffelin et al., 2010)	98
5.2	Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données simulées, modèle radiatif 1-D	101
5.3	Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données observées, modèle radiatif 1-D	102
5.4	Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données simulées, modèle radiatif 3-D, quadrature LC_{15} : 120 directions	102
5.5	Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données observées, modèle radiatif 3-D, quadrature LC_{15} : 120 directions	103
5.6	Évolution des profils du taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données simulées	105

5.7	Évolution des profils du taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données observées	105
5.8	Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données simulées	106
5.9	Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données observées	106
5.10	Évolution du contenu en eau liquide (LWC) simulé par le modèle 1-D et 3-D pour différentes méthodes de quadrature : S_6, S_8, LC_{15}, T_4	108
	(a) modèle 1-D	108
	(b) modèle 3-D, 32 dir	108
	(c) modèle 3-D, 48 dir	108
	(d) modèle 3-D, 80 dir	108
	(e) modèle 3-D, 120 dir	108
	(f) modèle 3-D, 128 dir	108
5.11	Évolution des profils de taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature T_2 : 32 directions, fichier météo : données simulées	109
5.12	Évolution des profils de taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et 3-D pour différentes méthodes de quadrature	110
	(a) modèle 3-D, 48 dir	110
	(b) modèle 3-D, 80 dir	110
	(c) modèle 3-D, 120 dir	110
	(d) modèle 3-D, 128 dir	110
5.13	Évolution du contenu en eau liquide (LWC) simulé par le modèle 1-D et 3-D avec un passage dans le module radiatif (a) toutes les itérations, (b) toutes les 10 itérations, (c) toutes les 60 itérations; quadrature LC_{15} pour une initialisation avec les données simulées	112
	(a) modèle 1-D	112
	(b) modèle 3-D, $nfreq = 1/1$	112
	(c) modèle 3-D, $nfreq = 1/10$	112
	(d) modèle 3-D, $nfreq = 1/60$	112
5.14	Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions avec $nfreq = 1/1, 1/10$ et $1/60$	113
	(a) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/1$	113
	(b) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/1$	113
	(c) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/10$	113
	(d) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/10$	113
	(e) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/60$	113
	(f) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/60$	113
5.15	Évolution de la température simulée à 30m par le modèle 1-D et le modèle 3-D pour les deux types d'initialisation avec $nfreq = 1/1, 1/10$ et $1/60$	115
	(a) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/1$	115

(b)	fichier météo : données simulées, nfreq = 1/1	115
(c)	fichier météo : données observées, nfreq = 1/10	115
(d)	fichier météo : données simulées, nfreq = 1/10	115
(e)	fichier météo : données observées, nfreq = 1/60	115
(f)	fichier météo : données simulées, nfreq = 1/60	115
5.16	Méthode de construction des maillages en terrain complexe et milieu bâti (Bresson, 2014)	117
5.17	Maillage d'un site industriel (Bresson 2013)	118
5.18	Maillage en milieu bâti idéalisé	119
5.19	Évolution du champ 3-D d'eau liquide dans le domaine	121
(a)	21h00	121
(b)	21h45	121
(c)	22h30	121
(d)	23h15	121
(e)	00h00	121
(f)	00h45	121
(g)	01h30	121
(h)	02h15	121
(i)	03h00	121
(j)	03h45	121
(k)	04h30	121
(l)	05h15	121
5.20	Illustration des effets radiatifs 3-D générés par la présence de bâti . .	122
5.21	Effets radiatifs 3-D entre l'eau liquide nuageuse, le sol et les parois des bâtiments	122
(a)	23h10	122
(b)	23h30	122
(c)	01h30	122
6.1	Évolution des profils de température - comparaisons des simulations aux mesures de ParisFog	133
(a)	1-D	133
(b)	T2	133
(c)	T4	133
(d)	S6	133
(e)	S8	133
(f)	LC15	133
6.2	Température à 2m et 30m - comparaisons des simulations aux mesures de ParisFog	134
(a)	température à 2m	134
(b)	température à 30m	134
6.3	Flux montant et descendant à 2m et 30m - comparaisons des simula- tions aux mesures de ParisFog	134
(a)	flux montant à 2m	134
(b)	flux montant à 30m	134
(c)	flux descendant à 2m	134
(d)	flux descendant à 30m	134

Liste des tableaux

2.1	Quadratures existantes et nouvelles dans <i>Code_Saturne</i>	34
2.2	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures T_2 et T_4 avec entre parenthèses, les erreurs relatives avant correction des poids . . .	41
2.3	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures S_4 , S_6 et S_8 .	41
2.4	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures <i>DCT020</i> – 2468 et <i>LC</i> – 15	42
2.5	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures T2 et T4	45
2.6	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures S4, S6 et S8	45
2.7	Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures DCT020-2468 et LC15	46
4.1	Écart relatif entre la solution de référence <i>Code_Saturne</i> 1-D et les valeurs calculées par <i>Code_Saturne</i> 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures T_2 et T_4	73
4.2	Écart relatif entre la solution de référence <i>Code_Saturne</i> 1-D et les valeurs calculées par <i>Code_Saturne</i> 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures S_4 , S_6 et S_8	73
4.3	Écart relatif entre la solution de référence <i>Code_Saturne</i> 1-D et les valeurs calculées par <i>Code_Saturne</i> 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures <i>DCT020</i> – 2468 et <i>LC</i> – 15	74
4.4	Écart relatif moyen entre les codes radiatifs 1-D et 3-D du flux incident à la surface Q_{inc} du taux de réchauffement S_{rad}	90
5.1	Différences entre les fichiers météorologiques utilisés pour l'initialisation des simulations	104
6.1	Quelques informations sur les temps de calcul du modèle de rayonnement 3-D	130

Introduction

*Il te faut trouver dix vérités
durant le jour ; autrement tu
chercheras des vérités durant la
nuit et ton âme restera affamée.*

— F. Nietzsche, Ainsi parlait
Zarathoustra

Si l'enjeu de la qualité de l'air est devenu une priorité pour la santé publique, la modélisation de la couche limite atmosphérique (CLA) est un préalable nécessaire aux calculs de dispersion atmosphérique, qui permet notamment d'anticiper les risques d'accidents industriels et d'estimer leur impact environnemental (dispersion de radionucléides à Tchernobyl et Fukushima).

Dans ce contexte, le Centre d'Enseignement et de Recherche en Environnement Atmosphérique (CEREA) développe des outils numériques complémentaires afin d'alerter et d'aider à la prise de décision les pouvoirs publics et les industriels quant aux risques environnementaux causés par l'activité humaine et industrielle. Parmi ceux-ci, on trouve la plateforme polyphemus (Mallet et al., 2007), qui regroupe un ensemble d'outils de modélisation de la pollution de l'air à différentes échelles et le module atmosphérique du code de mécanique des fluides **Code_Saturne** (Archambeau et al., 2004) permettant de résoudre les écoulements à petite échelle en milieu bâti et/ou en géométrie complexe.

La résolution de ces écoulements à échelle locale passe par une bonne compréhension des forçages radiatifs. En effet, le rayonnement est un des processus importants, responsable des transferts d'énergie dans l'atmosphère. Durant la journée la couche superficielle du sol et l'atmosphère absorbent une partie du rayonnement de courtes longueurs d'onde émis par le soleil. La nuit, une partie de l'énergie emmagasinée par le système {terre-atmosphère} est restituée à l'espace sous forme de rayonnement infrarouge. La prévision météorologique aux différentes échelles spatiales passe par une bonne compréhension des déséquilibres radiatifs et thermiques.

Ces derniers sont encore plus marqués en milieu urbain et ont fait l'objet de nombreuses études à travers notamment l'îlot de chaleur urbain (ICU). Ce phénomène est caractérisé par des températures plus élevées la nuit en ville qu'à la campagne. Si les ICU atténuent les effets du froid en ville, ils posent néanmoins de nombreux problèmes :

- ils diminuent la formation de brouillard et de rosée permettant l'épuration de l'air des aérosols et des particules en suspension,
- ils participent à la formation des smogs et aux inversions thermiques (source de confinement de la pollution),
- en modifiant la composition chimique de l'atmosphère, ils favorisent certaines pollutions photo-chimiques.

Si les travaux de Milliez (2006) et Qu (2011) ont permis l'amélioration de la prise en compte des effets radiatifs tridimensionnels en milieu urbain, ces études ont été faites en milieu transparent. Les travaux de Zhang (2011) sur le cycle de vie du brouillard et l'influence des hétérogénéités spatiales ont, quant à eux, été effectués à l'aide de modèles de rayonnement solaire et infrarouge unidimensionnels.

L'objet de cette thèse est donc de prendre en compte les effets radiatifs infrarouges 3-D en milieu absorbant dans la modélisation de la couche limite atmosphérique à l'échelle locale avec un modèle radiatif pénalisant le moins possible le temps de calcul.

Le rayonnement infrarouge est un processus physique qui joue un rôle essentiel à travers son interaction avec les nuages. C'est d'ailleurs le phénomène physique le plus important qui pilote la formation du brouillard (Davis, 1994). L'étude du rayonnement atmosphérique soulève la question d'une approche 1-D, 2-D ou 3-D pour la résolution de l'Équation des Transferts Radiatifs (ETR) et celle du modèle pour l'intégration sur la longueur d'onde. Avec l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, des traitements numériques sophistiqués ont vu le jour. Les méthodes de Monte-Carlo (Fleck, 1961) pour la résolution angulaire ou encore la méthode Line-by-Line – qui utilise la base de données spectrales HITRAN (Rothman et al., 1992) – pour l'intégration sur le spectre ont pour but de résoudre, de manière très précise, l'ETR. Cependant, dans les simulations des écoulements atmosphériques, les transferts radiatifs ne sont qu'un aspect du problème global. Ils sont couplés à la simulation de la thermodynamique à travers la divergence du flux radiatif, dans l'équation du bilan d'énergie. Le calcul radiatif peut alors représenter 70% du temps calcul.

Dans un souci d'équilibre entre temps de calcul et précision, SHDOM (Evans, 1998) propose un bon compromis en combinant une résolution directionnelle de l'ETR et un modèle à bandes pour l'intégration des grandeurs radiométriques sur le spectre. Pourtant, de nombreuses études de couche limite nocturne adoptent des schémas intégrés sur l'ensemble du spectre, dits en émissivité. Ils permettent de calculer à moindre coût les grandeurs radiatives mises en jeu dans le bilan d'énergie et de décrire les interactions entre le rayonnement et les autres processus de transport dans la couche limite. Cette approche efficace est unidimensionnelle et ne peut donc prendre en compte les effets du milieu bâti, d'un terrain complexe ou encore des structures nuageuses 3-D. Appelés modèles en gaz gris – car ils n'intègrent pas les transferts radiatifs sur la longueur d'onde (couleur) –, ils sont également utilisés pour certaines applications en oxy-combustion industrielle de *Code_Saturne* .

Comment adapter le modèle radiatif 1-D en émissivité pour la paramétrisation de l'absorption gazeuse dans l'atmosphère au code radiatif 3-D utilisant la méthode des ordonnées discrètes (MOD) ?

Afin de répondre à cette problématique, le manuscrit est organisé de la façon suivante :

Le chapitre 1 présente les grandeurs radiométriques et l'équation des transferts radiatifs (ETR) ainsi que les modélisations du transfert radiatif disponibles dans *Code_Saturne* . Dans le chapitre 2, nous présentons brièvement les différentes méthodes de résolution 3-D de l'ETR ainsi que les modifications apportées au solveur 3-D de l'ETR. Celles-ci font l'objet d'une étude détaillée permettant de quantifier les incertitudes des calculs, liées à la résolution angulaire des transferts radiatifs. Le chapitre 3 est consacré à la modélisation des propriétés radiatives en milieu atmosphérique dans la gamme de l'infrarouge. Nous détaillerons la conception de ce nouveau modèle d'absorption gazeuse du rayonnement infrarouge atmosphérique. Le chapitre 4 propose une intercomparaison entre la modélisation 1-D du rayonnement infrarouge et la modélisation 3-D proposé dans le chapitre 3, à l'aide d'un jeu de données de simulation issu de la campagne PARISFOG . Enfin, dans le chapitre 5, nous présentons le couplage dynamique entre le modèle 3-D de rayonnement infrarouge et la thermodynamique du module atmosphérique de *Code_Saturne* sur des données expérimentales et simulées d'un cas de brouillard radiatif.

Chapitre 1

Généralités sur le rayonnement

Introduction

- *Ma mère ne se console pas de n'avoir épousé qu'un agrégé de Mathématiques alors que son frère a réussi si brillamment dans la vie.*

- *Votre père est agrégé de Mathématiques ?*

- *Oui, il est Professeur au Collège de France et membre de l'Institut ou quelque chose comme ça... dit Alise, c'est lamentable... à trente-huit ans. Il aurait pu faire un effort. Heureusement qu'il y a Oncle Nicolas.*

— B. Vian, L'écume des jours

*La simulation de la couche limite atmosphérique nocturne (CLN) nécessite une modélisation suffisamment fine pour quantifier les échanges radiatifs, processus clé dans la formation et l'évolution de la CLN. Dans ce chapitre, nous allons définir les notions nécessaires à la compréhension des transferts radiatifs, ce qui nous permettra ensuite d'introduire l'Équation des Transferts Radiatifs. Nous terminerons ce chapitre par la présentation des différents modèles radiatifs disponibles dans le logiciel de calcul de mécanique des fluides **Code_Saturne**.*

Sommaire

1.1 Définitions des grandeurs radiatives, Lois fondamentales	9
1.1.1 L'Équation des Transferts Radiatifs	9
1.1.2 Les conditions aux limites radiatives atmosphériques . . .	11
1.1.3 Les grandeurs radiatives	12
1.1.4 Les propriétés radiatives atmosphériques	13
1.2 Modélisation des Transferts Radiatifs dans le code de mécanique des fluides <i>Code_Saturne</i>	13

1.2.1	Modélisation 3-D	13
1.2.2	Modélisation 1-D	18

1.1 Définitions des grandeurs radiatives, Lois fondamentales

Tout corps émet des ondes électromagnétiques et peut absorber ou diffuser celles provenant des autres émetteurs. L'émission, l'absorption et la diffusion sont ainsi les trois processus physiques rencontrés dans les transferts radiatifs. Ils traduisent une perte ou un gain d'énergie cinétique des molécules, atomes ou électrons libres du corps considéré (Modest, 2003). Le rayonnement thermique ne couvre pas tout le spectre des longueurs d'onde et concerne seulement l'ultraviolet, le visible et l'infrarouge. Cela correspond à un intervalle spectral $[0.1\mu m, 100\mu m]$.

Pour décrire les transferts radiatifs, on définit la luminance monochromatique $I_\lambda(s, \vec{S})$ ($W.m^2.sr^{-1}.\mu m^{-1}$) qui est la grandeur énergétique la plus adéquate. Elle correspond à la puissance rayonnée dP par unité d'angle solide $d\Omega$ autour d'une direction \vec{S} et par unité de surface projetée dS sur un intervalle de longueur d'onde $d\lambda$, à l'abscisse $s = (x, y, z)$.

$$I(s, \vec{S}) = \frac{dP}{dS \cos \theta d\lambda d\Omega} \quad (1.1)$$

La direction de propagation \vec{S} est repérée par l'angle polaire θ et l'angle azimuthal ϕ . Pour une surface Σ donnée, l'angle solide est la surface découpée sur la sphère unité par le cône de sommet O s'appuyant sur la surface Σ . C'est l'angle (solide) sous lequel on voit Σ depuis O.

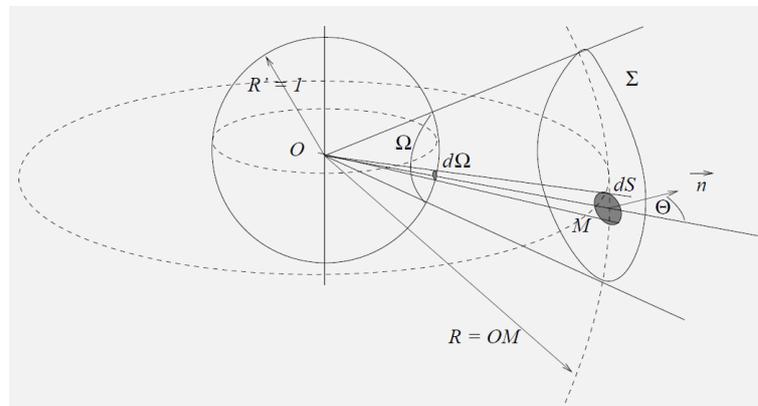


FIGURE 1.1 – Représentation de l'angle solide

L'élément d'angle solide $d\Omega$ s'écrit ainsi :

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \quad (1.2)$$

En intégrant l'équation précédente pour $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi[$, l'angle solide sous lequel on voit toute la surface de la sphère est 4π stéradians.

1.1.1 L'Équation des Transferts Radiatifs

Les transferts radiatifs sont régis par une équation de convection de la luminance que l'on appelle Équation des Transferts Radiatifs. La variation de luminance le long

de la direction \vec{S} pour une longueur d'onde donnée entre les abscisses s et $s + ds$ pendant une durée dt est notée :

$$dI_\lambda = I_\lambda \left(s + ds, \vec{S}, t + dt \right) - I_\lambda \left(s, \vec{S}, t \right) \quad (1.3)$$

Pour un milieu participatif (non transparent) non diffusif, la luminance est atténuée par l'absorption et augmentée par l'émission. La perte de luminance par absorption est :

$$(dI_\lambda)_{\text{absorption}} = -k_\lambda I_\lambda ds \quad (1.4)$$

avec k_λ le coefficient d'absorption monochromatique du milieu. Dans le même temps, le gain de luminance par émission est :

$$(dI_\lambda)_{\text{émission}} = k_\lambda I_\lambda^o ds \quad (1.5)$$

où $I_\lambda^o (W.m^{-2}.sr^{-1})$ est la luminance monochromatique du corps noir :

$$I_\lambda^o = \frac{2hc^2\lambda^{-5}}{\exp\left(\frac{hc}{k_B\lambda T}\right) - 1} \quad (1.6)$$

avec h la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmann, c la célérité de la lumière dans le milieu, λ la longueur d'onde dans le milieu et T la température. Notons que la constante de proportionnalité pour l'absorption et l'émission est la même, ce qui résulte de la loi de Kirchoff. En combinant 1.4 et 1.5 on obtient :

$$dI_\lambda = \underbrace{-k_\lambda I_\lambda ds}_{\text{absorption}} + \underbrace{k_\lambda I_\lambda^o ds}_{\text{émission}} \quad (1.7)$$

La luminance monochromatique dans la direction \vec{S} est fonction de la position s et du temps t . On peut alors écrire la différentielle totale de la luminance comme suit :

$$dI_\lambda = \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} ds + \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} dt \quad (1.8)$$

En utilisant 1.8 et en divisant 1.7 par ds , il vient que :

$$\frac{\partial I_\lambda}{\partial s} + \frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} = -k_\lambda I_\lambda + k_\lambda I_\lambda^o \quad (1.9)$$

Que ce soit pour des applications atmosphériques ou pour la combustion, la vitesse de la lumière est si grande par rapport aux échelles de temps locales des applications citées précédemment, que le terme instationnaire peut être négligé. Tout au long de ce document, c'est la forme stationnaire qu'il faudra considérer lorsque nous évoquerons l'ETR :

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla} \right) I_\lambda = -k_\lambda I_\lambda + k_\lambda I_\lambda^o \quad (1.10)$$

La résolution de cette équation passe par la connaissance du champ de température pour l'évaluation du second membre. Dans les applications atmosphériques, les transferts radiatifs sont couplés à la mécanique des fluides. L'accès à la luminance en tous points de l'espace nous permet de calculer les grandeurs radiatives qui participent au bilan d'énergie avec la convection et la conduction. Avant de définir ces grandeurs, revenons sur la résolution de l'ETR et notamment sur les conditions aux limites dans l'atmosphère.

1.1.2 Les conditions aux limites radiatives atmosphériques

Considérons une portion d'atmosphère afin d'illustrer les différents cas rencontrés, à savoir :

- les surfaces opaques comme le sol,
- les surfaces dites « ouvertes » comme les bords et le haut du domaine.

Une première approximation est faite sur les surfaces opaques que l'on considère comme lambertiennes ou encore à réflexion diffuse. Autrement dit, la partie réfléchie des rayons incidents à la paroi est redistribuée dans toutes les directions du demi-espace intérieur. L'autre composante de la luminance pariétale est l'émission propre de la paroi. Selon le type de matériau, une paroi va émettre plus ou moins d'énergie. Ce pouvoir émetteur est appelé émissivité et noté ϵ_λ . L'émissivité varie de 0 à 1 où, dans ce dernier cas, on parle de corps noir, c'est-à-dire un corps idéal qui, pour une température donnée, émet le maximum d'énergie. Sa luminance est donnée par la loi de Planck (1.6). La luminance émanant de la paroi au point s_p dans la direction \vec{S} est :

$$I_\lambda \left(s_p, \vec{S} \right) = \epsilon_\lambda I_\lambda^o(s_p) + (1 - \epsilon_\lambda) Q_{\lambda_{\text{inc}}} (s_p) \quad (1.11)$$

Considérons à présent les autres types de frontières rencontrées. Pour des raisons évidentes de coût de calcul, il n'est pas envisageable de simuler les transferts radiatifs autrement que sur un domaine tronqué. Dans le cas des frontières latérales « ouvertes », on peut imposer des conditions aux limites périodiques. Soit \mathcal{V} le domaine considéré de dimension $L_x \times L_y \times L_z$. La Luminance doit ainsi vérifier les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla} \right) I_\lambda &= -k_\lambda I_\lambda + k_\lambda I_\lambda^o \\ I_\lambda \left((0, y, z), \vec{S} \right) &= I_\lambda \left((L_x, y, z), \vec{S} \right) \quad (y, z) \in [0, L_y] \times [0, L_z] \\ I_\lambda \left((x, 0, z), \vec{S} \right) &= I_\lambda \left((x, L_y, z), \vec{S} \right) \quad (x, z) \in [0, L_x] \times [0, L_z] \end{aligned} \quad (1.12)$$

Cette formulation des conditions aux limites radiatives implique donc un équilibre radiatif aux frontières latérales entre le domaine et l'extérieur : le rayonnement qui entre est égal au rayonnement qui sort. Toutefois, si une source radiative se trouve à l'extérieur du domaine, l'hypothèse d'équilibre radiatif de notre portion

d'atmosphère n'est plus valide. Il faut donc, dans ce cas, imposer une valeur de la luminance aux parois latérales.

Pour la condition à la limite supérieure, $I_\lambda((x, y, +\infty), \vec{S}) = 0$. A partir de l'altitude $z = 44km$, on considère le vide moléculaire, caractérisé par une luminance nulle. Pour nos applications atmosphériques à petite échelle (quartiers urbains), seuls les 3000 premiers mètres présentent un intérêt. Au-dessus de cette altitude, les effets thermiques et dynamiques du sol n'impactent plus directement l'atmosphère. Pour cette raison et pour réduire les coûts de calculs, nous avons limité notre domaine en hauteur et modifié la condition à la limite supérieure en conséquence. Voyons à présent les autres grandeurs radiatives intervenant dans le bilan énergétique.

1.1.3 Les grandeurs radiatives

Ce n'est pas la luminance mais le taux de réchauffement S_{rad} ($K.s^{-1}$) qui est pris en compte dans l'équation de conservation de l'énergie :

$$S_{\text{rad}} = \frac{-1}{\rho C_p} \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}} \quad (1.13)$$

où \vec{Q}_{rad} est la densité de flux radiatif en $W.m^{-2}$:

$$\vec{Q}_{\text{rad}} = \int_{4\pi} \int_{\lambda=0}^{+\infty} I_\lambda(\vec{S}) \vec{S} d\lambda d\Omega = \int_{4\pi} I(\vec{S}) \vec{S} d\Omega \quad (1.14)$$

La résolution de l'ETR permet ainsi d'accéder aux grandeurs énergétiques permettant de calculer le taux de refroidissement ou de réchauffement de l'atmosphère. Soit \mathcal{V} un volume de densité de flux radiatif \vec{Q}_{rad} et \vec{n} la normale extérieure à la surface \mathcal{S} . Le flux net radiatif à travers \mathcal{S} noté Q_{net} est relié à \vec{Q}_{rad} par la relation suivante :

$$Q_{\text{net}} = \vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n} \quad (1.15)$$

Une autre formulation de S_{rad} est possible en intégrant directement l'ETR (1.19) sur l'angle solide :

$$\int_{4\pi} (\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I(s, \vec{S}) d\Omega = \int_{4\pi} \left[-k(s)I(s, \vec{S}) + k(s)I^o(s) \right] d\Omega \quad (1.16)$$

En permutant l'intégrale sur l'angle solide et l'opérateur de divergence dans (1.16) on obtient :

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\int_{4\pi} I(s, \vec{S}) \vec{S} d\Omega \right) = \int_{4\pi} \left[-k(s)I(s, \vec{S}) + k(s)I^o(s) \right] d\Omega \quad (1.17)$$

En remarquant que $\int_{4\pi} I(s, \vec{S}) \vec{S} d\Omega = \vec{Q}_{\text{rad}}$, on obtient la formulation semi-analytique du terme source radiatif :

$$S_{\text{rad}}(s) = \frac{-1}{\rho(s)C_p(s)} \left[\int_{4\pi} k(s)I(s, \vec{S}) d\Omega - \underbrace{4k(s)\sigma T^4(s)}_{\text{analytique}} \right] \quad (1.18)$$

1.1.4 Les propriétés radiatives atmosphériques

L'énergie émise par le système { Terre + Atmosphère } se réfère au rayonnement thermique infrarouge. L'enveloppe du spectre d'émission est proche du spectre émis par un corps noir dont la température avoisine les 290K (température moyenne de la surface terrestre).

Une grande partie de l'énergie thermique infrarouge est captée par les différents gaz atmosphériques. Parmi ceux-ci, on compte le dioxyde de carbone, la vapeur d'eau et l'ozone qui sont les principaux absorbants auxquels nous nous intéresserons par la suite. La quantité d'énergie captée par les agents gazeux dépend de plusieurs variables dont la longueur d'onde. Une large partie des travaux menés sur l'étude des transferts radiatifs est consacrée aux méthodes de calcul du coefficient d'absorption du milieu.

Dans les applications atmosphériques, on trouve un large éventail de méthodes permettant de modéliser les phénomènes d'absorption. Dans le chapitre 3, nous présenterons les différents traitements numériques pour modéliser les propriétés radiatives du milieu qui permettent ainsi l'intégration sur la longueur d'onde des grandeurs radiométriques.

1.2 Modélisation des Transferts Radiatifs dans le code de mécanique des fluides *Code_Saturne*

Code_Saturne est un logiciel de simulation de mécanique des fluides qui dispose de modules de physiques particulières avec notamment deux modèles de transferts radiatifs :

- Une modélisation unidimensionnelle (1-D) implantée au sein du module atmosphérique
- Une modélisation tridimensionnelle (3-D) développée pour les physiques particulières suivantes : incendies, combustion de fuel, charbon pulvérisé, arc électrique
- Une modélisation (3-D) basée sur une troncature à l'ordre 1 du développement en harmoniques sphériques de la luminance, valide pour un milieu épais.

La modélisation 1D des transferts radiatifs est très efficace et robuste pour décrire les échanges radiatifs dans une atmosphère homogène horizontalement. Dans ces conditions, la composition gazeuse ne varie principalement que suivant la verticale. Afin de capter certains effets radiatifs 3-D, nous avons donc adapté le code radiatif 3-D en milieu gris au cas atmosphérique. Ces deux modèles radiatifs font l'objet d'une description détaillée dans les deux sections suivantes.

1.2.1 Modélisation 3-D

On se place sous l'hypothèse d'un milieu non diffusant. De ce fait, l'extinction est réduite au phénomène d'absorption et la fonction source à l'émission.

$$\underbrace{(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I_\lambda(s, \vec{S})}_{\text{transport}} = \underbrace{-k_\lambda(s) I_\lambda(s, \vec{S})}_{\text{absorption}} + \underbrace{k_\lambda(s) I_\lambda^o(s)}_{\text{émission}} \quad (1.19)$$

Par ailleurs, l'approximation « grise » consiste à résoudre l'ETR intégrée sur la longueur d'onde. En permutant l'opérateur de divergence et l'intégrale dans le terme de transport et en définissant les variables radiatives grises, c'est-à-dire intégrées sur le spectre,

$$\begin{aligned} I(s, \vec{S}) &= \int_0^\infty I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda \\ k(s) &= \int_0^\infty k_\lambda(s) I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda \Big/ \int_0^\infty I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda \\ I^o(s) &= \int_0^\infty I_\lambda^o(s) d\lambda \end{aligned}$$

l'ETR pour un milieu gris non diffusant s'écrit :

$$\left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}\right) I(s, \vec{S}) = -k(s)I(s, \vec{S}) + k(s)I^o(s). \quad (1.20)$$

L'intégration sur la longueur d'onde de la luminance du corps noir $I_\lambda^o(s)$ permet de retrouver la loi de Stefan :

$$I^o(s) = \int_0^\infty I_\lambda^o(s) d\lambda = \sigma T(s)^4 \quad (1.21)$$

où σ est la constante de Stefan. C'est l'équation (1.20) qui est résolue par le solveur radiatif 3-D de **Code_Saturne** implanté par Douce and Méchitoua (2004). Si nous laissons de côté pour l'instant la modélisation du coefficient d'absorption $k(s)$ en le supposant connu en tous points de l'espace, la résolution de l'ETR ci-dessus nécessite une intégration spatiale pour accéder aux champs radiatifs en tout point du domaine simulé, mais également une intégration sur l'espace angulaire afin de prendre en compte la variation directionnelle de la luminance. La méthode des ordonnées discrètes (Chandrasekhar, 1950) permet de découpler la propagation spatiale et directionnelle du rayonnement. L'idée est de définir un nombre fini de directions de propagation le long desquelles on résout (spatialement) l'ETR. A chacune des directions discrètes est associé un poids représentant son angle solide. L'intégration angulaire est ainsi effectuée par une méthode de quadrature qui consiste à remplacer l'intégrale sur l'angle solide par une somme sur les directions discrètes pondérées par leurs poids associés. Nous détaillerons dans le chapitre suivant le choix des directions discrètes, conditionnant le type de quadrature utilisé.

1.2.1.1 L'intégration spatiale

La résolution spatiale de l'ETR permet la connaissance du champ de luminance en tout point de l'espace selon une direction de propagation. Pour des raisons de simplicité, la résolution de l'ETR, qui n'est rien d'autre qu'une équation de convection, est assurée par la méthode des volumes finis, utilisée pour la résolution des équations du fluide. Aussi les points de discrétisation (centres de cellules) de l'ETR coïncident avec ceux de Navier-Stokes – équation régissant l'écoulement. L'idée judicieuse d'appliquer la méthode des volumes finis, largement utilisée pour résoudre les équations du fluide, à la résolution spatiale de l'ETR est à mettre à l'actif de

Fiveland (1984).

Nous allons à présent écrire l'ETR discrétisée pour une direction donnée \vec{S}^k . On intègre l'ETR (1.20) sur un volume de contrôle V_I occupé par la cellule d'indice I . On notera J l'indice d'un voisin de I , ∂V_I l'adhérence de V_I , Γ_{IJ} la surface entre la cellule I et J , \vec{n}_{IJ} la normale à Γ_{IJ} orientée de I vers J et $|\cdot|$ comme étant une mesure sur \mathbf{R}^n , avec $n < 3$. Les variables sont considérées constantes au sein d'un volume de contrôle V_I . Pour une grandeur Φ quelconque cette approximation s'écrit,

$$\Phi_I = \frac{1}{V_I} \int_{V_I} \Phi(s) dV_I. \quad (1.22)$$

L'intégration de l'ETR le long de la direction \vec{S}^k sur le volume de contrôle V_I donne :

$$\int_{V_I} \left(\vec{S}^k \cdot \vec{\nabla} \right) I^k(s, \vec{S}^k) dV_I = \int_{V_I} -k(s) I(s, \vec{S}^k) + k(s) I^o(s) dV_I \quad (1.23)$$

En vertu du théorème de la divergence, l'équation (1.23) devient :

$$\int_{\partial V_I} I(s, \vec{S}^k) \vec{S}^k \cdot \vec{d}\sigma = \int_{V_I} \left(-k(s) I(s, \vec{S}^k) + k(s) I^o(s) \right) dV_I \quad (1.24)$$

où $\vec{d}\sigma$ est le vecteur normal extérieur à ∂V_I dont la norme vaut $|\Gamma_{IJ}|$. En remplaçant l'intégrale sur la surface ∂V_I par une somme discrète sur les faces internes, constituant la frontière du volume de contrôle, et en utilisant l'approximation (1.22) ainsi que les notations définies plus haut, la formulation de l'ETR en volumes finis est :

$$\sum_{J \in \text{Vois}(I)} \left(I_{IJ}^k \vec{S}^k \cdot \Gamma_{IJ} \vec{n}_{IJ} \right) = |V_I| \left(-k_I I_I^k + k_I \sigma T_I^4 \right) \quad (1.25)$$

où $I^k = I(\vec{S}^k)$ est la luminance dans la direction \vec{S}^k , I_{IJ} la luminance sur la face frontière entre le volume I et J , σ la constante de Stefan et T_I est la température du volume I . La luminance est le scalaire résolu pour chaque centre de volume de contrôle. Dans l'équation (1.25) apparaît la luminance à la face frontière entre I et J qui doit donc être interpolée en fonction de la luminance au centre de chaque volume de contrôle.

Le choix du schéma numérique d'interpolation pour la luminance à la face reste un sujet actif de recherche dans la communauté du transfert radiatif. Les méthodes de volumes finis ont été développées dans le but de résoudre au mieux les équations de conservation de la mécanique des fluides. De nombreux schémas d'interpolation des grandeurs aux faces frontières, qui apparaissent suite à la discrétisation du terme d'advection, ont été développés et utilisés pour la résolution de l'ETR. Un seul schéma a été conservé dans **Code_Saturne** pour l'interpolation de la luminance. Il s'agit du schéma upwind ou donor cell :

$$\begin{aligned} \text{si } \vec{S}^k \cdot \Gamma_{IJ} \vec{n}_{IJ} > 0, \text{ alors } I_{IJ}^k &= I_I^k \\ \text{si } \vec{S}^k \cdot \Gamma_{IJ} \vec{n}_{IJ} < 0, \text{ alors } I_{IJ}^k &= I_J^k \end{aligned}$$

L'équation (1.25) conduit donc à la résolution d'un système linéaire, effectuée par une méthode itérative de Jacobi ou de Gauss-Seidel, qui permet de déterminer $I(s, \vec{S})$ en chaque centre de cellule.

1.2.1.2 L'intégration angulaire

La luminance est, par définition, une grandeur directionnelle et son intégration selon l'angle solide n'a pas de signification physique. Le problème de l'intégration angulaire de l'ETR est lié au calcul de la densité de flux radiatif Q_{rad} et du taux de réchauffement S_{rad} . La résolution de l'ETR pour chaque direction discrète \vec{S}^k pour $k = \{1, 2, \dots, N_{\text{dir}}\}$ permet de calculer la luminance en tout point de l'espace et ainsi, de calculer les deux grandeurs radiométriques \vec{Q}_{rad} et S_{rad} avec une quadrature angulaire. Cette méthode d'intégration numérique consiste à remplacer l'intégrale sur l'angle solide par la somme sur les directions discrètes, pondérée par les angles solides entourant chaque direction :

$$\int_{4\pi} f(\vec{S})d\Omega = \sum_{k=1}^N f(\vec{S}_k)\omega_k \quad (1.26)$$

En reprenant, les notations utilisées pour la discrétisation spatiale, la densité de flux radiatif dans la cellule I s'écrit :

$$Q_{\text{rad}I}^{\vec{S}} = \int_{4\pi} I_I(\vec{S})\vec{S}d\Omega \quad (1.27)$$

En appliquant une quadrature angulaire à N_{dir} nombres de directions discrètes \vec{S}^k auxquelles on associe les poids ω_k , la densité de flux radiatif devient :

$$Q_{\text{rad}I}^{\vec{S}} = \sum_{k=1}^{N_{\text{dir}}} I_I^k \vec{S}^k \omega_k \quad (1.28)$$

Pour le calcul du terme source radiatif S_{rad} (1.13), il suffit alors de formuler la divergence de la densité du flux radiatif au sens des volumes finis comme pour le terme d'advection de l'ETR. Dans la cellule I , la formulation discrète de S_{rad} s'écrit :

$$S_{\text{rad}I} = \sum_{k=1}^{N_{\text{dir}}} \sum_{J \in \text{Vois}(I)} I_{IJ}^k \Gamma_{IJ} \omega_k \vec{S}^k \cdot \vec{n}_{IJ} \quad (1.29)$$

La formulation semi-analytique est obtenue en remplaçant l'intégrale sur 4π par la somme discrètes sur les directions, pondérée par les poids de la quadrature angulaire.

$$S_{\text{rad}}(s) = \frac{-1}{\rho(s)C_p(s)} \left[\sum_{k=1}^{N_{\text{dir}}} k(s)I^k(s)\omega_k - \underbrace{4k(s)\sigma T^4(s)}_{\text{analytique}} \right] \quad (1.30)$$

Cette formulation (1.18) fait intervenir une décomposition du terme source en un terme d'absorption intégral et en un terme d'émission analytique, ce qui explique le choix du qualificatif semi-analytique. Bien que ces deux formulations soient mathématiquement équivalentes, leur mise en oeuvre numérique n'est évidemment pas la même, ainsi que les résultats qui s'ensuivent.

La relation (1.13) est une formulation conservative qui permet d'obtenir, outre le bilan local d'énergie radiative pour un volume de contrôle, le bilan global en sommant sur l'ensemble des cellules du domaine. L'intégration de (1.13) sur un volume de contrôle V de frontière Γ donne :

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = -\frac{-1}{\rho C_p} \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}} dV = -\frac{-1}{\rho C_p} \int_{\Gamma} \vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n} d\Gamma \quad (1.31)$$

Pour une paroi de normale \vec{n} , $\vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n}$ est par définition la densité de flux net radiatif Q_{net} . Il s'agit du bilan entre la densité de flux émis et la densité de flux incident absorbée par la paroi :

$$Q_{\text{net}} = \underbrace{\epsilon_p Q_{\text{incid}}}_{\text{absorption}} - \underbrace{\epsilon_p \sigma T_p^4}_{\text{émission}} \quad (1.32)$$

Aussi, la conservation de l'énergie radiative implique pour ce domaine :

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = -\frac{-1}{\rho C_p} \int_{\Gamma} Q_{\text{net}} d\Gamma \quad (1.33)$$

(1.33) traduit le fait que le bilan d'absorption-émission de l'énergie radiative du milieu est égal au bilan d'absorption-émission des parois entourant le milieu. L'inconvénient majeur de la formulation conservative est qu'elle est entièrement discrète, nécessitant le calcul numérique supplémentaire d'une divergence.

La relation (1.18) est une formulation semi-analytique (terme d'émission exact) qui permet d'extraire la partie implicite du terme source. Cependant, le bilan global d'énergie radiative n'est plus respecté. L'intégrale du terme source sur le volume n'est pas égal à l'intégrale du flux net sur la frontière du domaine. C'est pourquoi Douce and Méchitoua (2004) ont ajouté une option de calcul pour le terme source radiatif combinant la formulation conservative et semi-analytique. Ce dernier est pondéré par un facteur assurant la conservation globale de l'énergie radiative dans le domaine. Une sensibilité au calcul du taux de réchauffement sera faite dans le chapitre suivant.

Voyons à présent comment l'ETR est traitée par le module 1-D. Comme pour le module 3-D, nous allons détailler les hypothèses et les approximations utilisées dans le code radiatif atmosphérique unidimensionnel, pour finalement expliciter le terme source radiatif.

1.2.2 Modélisation 1-D

Chaque application nécessitant la résolution des transferts radiatifs possède un traitement mathématique et numérique spécifique, étroitement liée à la physique du problème. Ainsi, que le milieu soit optiquement épais ou mince, diffusant ou purement absorbant, que la température dans le domaine varie peu ou beaucoup, ou qu'il y ait une direction de propagation privilégiée du rayonnement, la forme de l'ETR considérée ainsi que sa résolution seront optimisées.

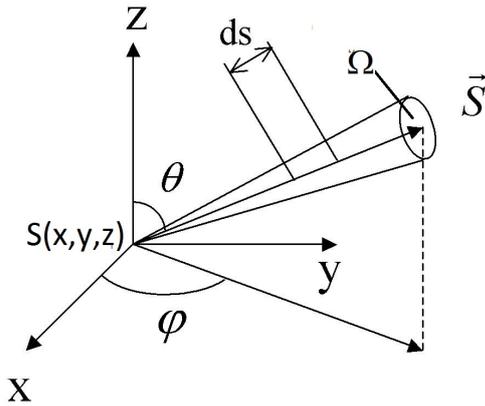
La particularité du transfert radiatif atmosphérique est que l'on suppose que la composition chimique de l'atmosphère est homogène horizontalement. Encore aujourd'hui, l'approximation, qui consiste à considérer que l'atmosphère est plan-parallèle et que les échanges radiatifs sont verticaux, est très utilisée, notamment dans les modèles de prévision numérique du temps. On peut également observer que par nature, le spectre du rayonnement provenant du sol et celui du haut de l'atmosphère sont très différents et qu'il convient de traiter séparément le rayonnement montant ou descendant. Pour ces raisons, l'approximation de Schuster-Schwartzchild (1905) dite « à deux flux », montant et descendant, est très populaire dans la communauté atmosphérique.

Dans cette section, nous allons dériver l'ETR jusqu'à l'obtention de la solution analytique des flux montant et descendant et du terme source radiatif.

Reprenons l'ETR pour un milieu non diffusant (1.19) :

$$(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I_\lambda(s, \vec{S}) = -k_\lambda(s) I_\lambda(s, \vec{S}) + k_\lambda(s) I_\lambda^o(s)$$

Par ailleurs, $\vec{S} \cdot \vec{\nabla} = S_x \frac{\partial}{\partial x} + S_y \frac{\partial}{\partial y} + S_z \frac{\partial}{\partial z}$ avec



\vec{S} est la direction de propagation du rayonnement.

θ est l'angle entre \vec{e}_z et \vec{S} .

$\mu = \cos \theta$ varie entre -1 et 1 .

\vec{e}_ϕ est la projection de \vec{S} dans le plan xy .

ϕ est l'angle entre \vec{e}_x et \vec{e}_ϕ .

$d\omega$ est un élément d'angle solide.

En coordonnées sphériques, les composantes de \vec{S} s'écrivent, dans le repère cartésien, de la façon suivante :

$$S_x = \frac{dx}{ds} = \sin \theta \cos \phi = (1 - \mu^2)^{1/2} \cos \phi$$

$$S_y = \frac{dy}{ds} = \sin \theta \sin \phi = (1 - \mu^2)^{1/2} \sin \phi$$

$$S_z = \frac{dz}{ds} = \cos \theta = \mu$$

Two-stream. Cette méthode consiste à écrire l'ETR sous la forme d'un système de deux équations pour les directions montantes et descendantes. Pour ce faire, on définit la luminance montante et descendante :

$$\begin{aligned} I_\lambda^\uparrow(z, \mu) &= I_\lambda(z, \mu), \mu > 0 \\ I_\lambda^\downarrow(z, \mu) &= I_\lambda(z, -\mu), \mu > 0. \end{aligned}$$

Cela nous permet d'obtenir la paire d'équations suivante :

$$\mu \frac{dI_\lambda^\uparrow(z, \mu)}{dz} = -k_\lambda(z) I_\lambda^\uparrow(z, \mu) + k_\lambda(z) I_\lambda^o(z) \quad (1.38)$$

$$\mu \frac{dI_\lambda^\downarrow(z, \mu)}{dz} = k_\lambda(z) I_\lambda^\downarrow(z, \mu) - k_\lambda(z) I_\lambda^o(z) \quad (1.39)$$

Pour la suite du manuscrit, nous définissons z_∞ comme l'altitude à partir de laquelle la luminance est nulle. En intégrant (1.38) entre 0 et z et (1.39) entre z et z_∞ , l'ETR s'écrit sous forme intégrale :

$$\begin{aligned} I_\lambda^\uparrow(z, \mu) &= I_\lambda^\uparrow(0, \mu) \exp \left[-\frac{1}{\mu} \int_0^z k_\lambda(z') dz' \right] \\ &\quad + \int_0^z I_\lambda^o(z') \frac{k_\lambda(z')}{\mu} \exp \left[-\frac{1}{\mu} \int_{z'}^z k_\lambda(z'') dz'' \right] dz' \end{aligned} \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} I_\lambda^\downarrow(z, \mu) &= I_\lambda^\downarrow(z_\infty, \mu) \exp \left[-\frac{1}{\mu} \int_z^{z_\infty} k_\lambda(z') dz' \right] \\ &\quad + \int_z^{z_\infty} I_\lambda^o(z') \frac{k_\lambda(z')}{\mu} \exp \left[-\frac{1}{\mu} \int_z^{z'} k_\lambda(z'') dz'' \right] dz' \end{aligned} \quad (1.41)$$

La transmittivité monochromatique entre les abscisses z' et z pour une direction de propagation d'angle θ par rapport à la verticale, telle que $\mu = \cos \theta$ est :

$$\mathcal{T}_\lambda \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) = \exp \left(-\frac{1}{\mu} \int_{z'}^z k_\lambda(z'') dz'' \right). \quad (1.42)$$

Cette définition (1.42) nous permet d'écrire notre paire d'équations sous une forme plus compacte :

$$I_\lambda^\uparrow(z, \mu) = I_\lambda^\uparrow(0, \mu) \mathcal{T}_\lambda \left(0, z, \frac{1}{\mu} \right) + \int_0^z I_\lambda^o(z') \frac{d\mathcal{T}_\lambda}{dz'} \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) dz' \quad (1.43)$$

$$I_\lambda^\downarrow(z, \mu) = I_\lambda^\downarrow(z_\infty, \mu) \mathcal{T}_\lambda \left(z, z_\infty, \frac{1}{\mu} \right) - \int_z^{z_\infty} I_\lambda^o(z') \frac{d\mathcal{T}_\lambda}{dz'} \left(z, z', \frac{1}{\mu} \right) dz'. \quad (1.44)$$

Aux luminances montante et descendante, on associe les flux montant et descendant :

$$F_\lambda^{\uparrow\downarrow}(z) = 2\pi \int_0^1 I_\lambda^{\uparrow\downarrow}(z, \mu) \mu d\mu$$

Les équations (1.43) et (1.44) sont intégrées sur l'angle solide pour obtenir notre système d'équation sur les flux :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) = 2\pi \int_0^1 I_{\lambda}^{\uparrow}(0, \mu) \mathcal{T}_{\lambda} \left(0, z, \frac{1}{\mu} \right) \mu d\mu \\ + 2\pi \int_0^1 \int_0^z I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\mathcal{T}_{\lambda}}{dz'} \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) \mu dz' d\mu \quad (1.45)$$

$$F_{\lambda}^{\downarrow}(z) = 2\pi \int_0^1 I_{\lambda}^{\downarrow}(z_{\infty}, \mu) \mathcal{T}_{\lambda} \left(z, z_{\infty}, \frac{1}{\mu} \right) d\mu \\ - 2\pi \int_0^1 \int_z^{z_{\infty}} I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\mathcal{T}_{\lambda}}{dz'} \left(z, z', \frac{1}{\mu} \right) \mu dz' d\mu \quad (1.46)$$

1.2.2.2 L'approximation diffuse, facteur de diffusivité

L'approximation diffuse consiste à éliminer la dépendance angulaire de la transmittivité à l'inclinaison μ . On va chercher une inclinaison constante $\tilde{\mu}$ telle que :

$$\mathcal{T}_{\lambda} \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) \cong \mathcal{T}_{\lambda} \left(z', z, \frac{1}{\tilde{\mu}} \right) = \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda} (z', z) \quad (1.47)$$

$\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda} (z', z)$ est la transmittivité diffuse. Le raisonnement qui va suivre s'inspire largement de Liou (1992) et de Lenoble (1993). Pour ce faire, on considère une atmosphère isotherme. La fonction de Planck ne dépend donc plus de l'altitude z . Dans ces conditions, on peut écrire que :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z, \mu) \propto 2 \int_0^1 \int_0^z \frac{d\mathcal{T}_{\lambda}}{dz'} \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) \mu dz' d\mu \quad (1.48)$$

Pour trouver le facteur de diffusivité $1/\tilde{\mu}$, on va effectuer l'intégration de (1.48) en commençant par l'intégrale sur μ . En supposant vraie notre relation (1.47), il vient que :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto \int_0^z \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}}{dz'} (z', z) dz' 2 \int_0^1 \mu d\mu \\ F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto 1 - \exp \left(-\frac{1}{\tilde{\mu}} \int_0^z k(z'') dz'' \right) \quad (1.49)$$

Par ailleurs, en intégrant (1.48) le long de $0 \rightarrow z$, le flux est proportionnel à :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto 2 \int_0^1 1 - \exp \left(-\frac{1}{\mu} \int_0^z k(z'') dz'' \right) \mu d\mu \\ F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto 1 - 2 \int_0^1 \exp \left(-\frac{1}{\mu} \int_0^z k(z'') dz'' \right) \mu d\mu \quad (1.50)$$

En posant le changement de variable $y = 1/\mu$, (1.50) devient :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto 1 - 2 \int_1^{\infty} \exp \left(-y \int_0^z k(z'') dz'' \right) \frac{1}{y^3} dy \quad (1.51)$$

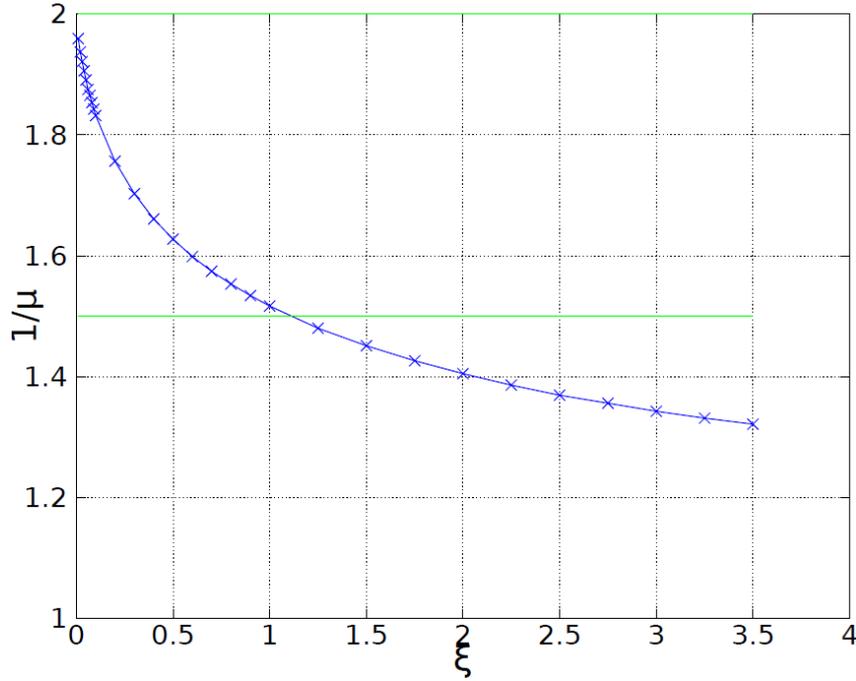


FIGURE 1.3 – Facteur de diffusivité $\frac{1}{\tilde{\mu}}$ en fonction du chemin optique ξ

En utilisant la définition de l'exponentielle intégrale d'ordre n (1.52) (Abramowitz and Stegun, 1964)

$$\mathcal{E}_n(x) = \int_1^{\infty} \exp(-xy)/y^n dy, \quad (1.52)$$

on remarque que :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) \propto 1 - 2\mathcal{E}_3\left(\int_0^z k(z'')dz''\right) \quad (1.53)$$

En introduisant la définition du chemin optique $\xi = \int_0^z k(z'')dz''$ et en combinant (1.49) et (1.53) on obtient la relation entre $\tilde{\mu}$ et ξ :

$$\frac{1}{\tilde{\mu}} = -\frac{\log(2\mathcal{E}_3(\xi))}{\xi} \quad (1.54)$$

La figure 1.3 représente le facteur de diffusivité $1/\tilde{\mu}$ en fonction du chemin optique ξ . Sur la figure 1.4, on voit que pour un facteur de diffusivité égal à $5/3 \cong 1.66$, l'approximation proposée par Elsasser (1942) est très bonne et reste encore aujourd'hui un moyen très efficace de pallier l'intégration angulaire pour le calcul des flux et du taux de réchauffement. Le calcul réalisé pour le flux montant vaut également pour le flux descendant.

Le modèle radiatif 1-D utilise donc cette approximation pour exprimer les flux

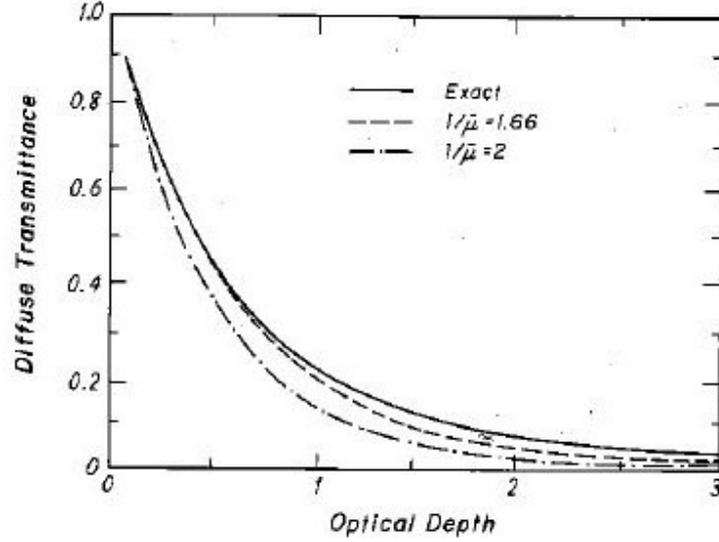


FIGURE 1.4 – Figure extraite de Liou (1992) : transmittivité diffuse exacte et calculée pour des facteurs de diffusivité de 1.66 et 2.

montant et descendant comme suit :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) = 2\pi \int_0^1 I_{\lambda}^{\uparrow}(0, \mu) \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(0, z) \mu d\mu + 2\pi \int_0^1 \int_0^z I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}}{dz'}(z', z) \mu dz' d\mu \quad (1.55)$$

$$F_{\lambda}^{\downarrow}(z) = 2\pi \int_0^1 I_{\lambda}^{\downarrow}(z_{\infty}, \mu) \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(z, z_{\infty}) \mu d\mu - 2\pi \int_0^1 \int_z^{z_{\infty}} I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}}{dz'}(z, z') \mu dz' d\mu \quad (1.56)$$

1.2.2.3 Les conditions aux limites radiatives

Dans les équations (1.55) et (1.56) nous allons expliciter les termes $I_{\lambda}^{\uparrow}(0, \mu)$ et $I_{\lambda}^{\downarrow}(z_{\infty}, \mu)$. Dans le cadre d'une atmosphère plane-parallèle, celle-ci est comprise entre le sol, $z = 0$ et le haut de l'atmosphère $z = z_{\infty}$ où l'on considère le vide moléculaire. Ainsi, en utilisant les conditions aux limites,

$$I_{\lambda}^{\uparrow}(0, \mu) = I^{\circ}(0) \quad (1.57)$$

$$I_{\lambda}^{\downarrow}(z_{\infty}, \mu) = 0, \quad (1.58)$$

les flux deviennent :

$$F_{\lambda}^{\uparrow}(z) = \pi I_{\lambda}^{\circ}(0) \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(0, z) + \pi \int_0^z I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}}{dz'}(z', z) dz' \quad (1.59)$$

$$F_{\lambda}^{\downarrow}(z) = -\pi \int_z^{z_{\infty}} I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}}{dz'}(z, z') dz' \quad (1.60)$$

1.2.2.4 L'intégration sur le spectre - modèle en émissivité

L'intégration sur le spectre est liée à la variation du coefficient d'absorption (dans la transmittivité diffuse) et de l'émission propre du corps noir avec la longueur d'onde.

Si l'intégration sur la longueur d'onde de la fonction de Planck est analytique,

$$\int_0^\infty I_\lambda^o(z) d\lambda = \frac{\sigma T^4}{\pi}, \quad (1.61)$$

il reste à calculer l'intégrale sur la longueur d'onde de la transmittivité diffuse pour pouvoir exprimer les flux montant et descendant :

$$F^\uparrow(z) = \int_0^\infty \pi I_\lambda^o(0) \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(0, z) d\lambda + \pi \int_0^\infty \int_0^z I_\lambda^o(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_\lambda}{dz'}(z', z) dz' d\lambda \quad (1.62)$$

$$F^\downarrow(z) = - \int_0^\infty \int_z^{z_\infty} \pi I_\lambda^o(z') \frac{d\tilde{\mathcal{T}}_\lambda}{dz'}(z, z') dz' d\lambda \quad (1.63)$$

Pour effectuer ce calcul, Elsasser (1942), Möller (1943) et Yamamoto (1952) ont développé des tables de calcul paramétrisant la valeur de l'émissivité d'une couche atmosphérique $z' \rightarrow z$.

$$\epsilon : (z', z) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^{+\infty} [1 - \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(z', z)] \pi I_\lambda^o(z') d\lambda. \quad (1.64)$$

L'émissivité représente le pouvoir d'absorption (et d'émission) d'une couche atmosphérique. La transmittivité diffuse étant comprise entre 0 et 1, l'émissivité l'est aussi. En utilisant la définition (1.64), les équations sur les flux montant (1.59) et descendant (1.60) deviennent :

$$F^\uparrow(z) = \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(0, z)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (1.65)$$

$$F^\downarrow(z) = \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (1.66)$$

où T_g est la température du sol. En vertu des formules de Green (intégration par parties), on peut écrire :

$$F^\uparrow = \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) - \left[\sigma T^4(z') \epsilon(z', z) \right]_{z'=0}^{z'=z} + \int_0^z \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.67)$$

$$F^\downarrow = \left[\sigma T^4(z') \epsilon(z', z) \right]_{z'=0}^{z'=z} - \int_z^{z_\infty} \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.68)$$

$$F^\uparrow = \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) + \epsilon(z, 0) \sigma T_{z=0}^4 + \int_0^z \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.69)$$

$$F^\downarrow = \epsilon(z_\infty, z) \sigma T^4(z_\infty) - \int_z^{z_\infty} \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.70)$$

Par ailleurs, le sol n'étant pas un corps noir, on introduit l'émissivité du sol ϵ_g . σT_g^4 devient donc $\epsilon_g \sigma T_g^4 + (1 - \epsilon_g) F^\downarrow(0)$.

$$F^\uparrow = (1 - \epsilon(z, 0)) (1 - \epsilon_g) (F^\downarrow(0) - \sigma T_g^4) + \sigma T_g^4 + \int_0^z \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.71)$$

$$F^\downarrow = \epsilon(z_\infty, z) \sigma T^4(z_\infty) - \int_z^{z_\infty} \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.72)$$

Le flux net $F_{\text{net}} = F^\uparrow(z) - F^\downarrow(z)$ ainsi défini, avec les expressions (1.71) et (1.72) et l'introduction de l'émissivité du sol est :

$$F_{\text{net}} = (1 - \epsilon_g) (F^\downarrow(0) - \sigma T_g^4) (1 - \epsilon(z, 0)) + \sigma T_g^4 + \int_0^z \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' - \epsilon(z_\infty, z) \sigma T^4(z_\infty) + \int_z^{z_\infty} \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \epsilon(z', z) dz' \quad (1.73)$$

L'expression du taux de réchauffement, terme source radiatif de l'équation sur la température potentielle est la suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial F_{\text{net}}}{\partial z} \quad (1.74)$$

En dérivant 1.73 par rapport à z ,

$$\frac{\partial F_{\text{net}}}{\partial z} = - (1 - \epsilon_g) (F^\downarrow(0) - \sigma T_g^4) \frac{\partial \epsilon}{\partial z}(z, 0) + \int_0^z \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \frac{\partial \epsilon}{\partial z}(z', z) dz' - \frac{\partial \epsilon}{\partial z}(z_\infty, z) \sigma T^4(z_\infty) + \int_z^{z_\infty} \frac{d\sigma T^4(z')}{dz'} \frac{\partial \epsilon}{\partial z}(z', z) dz' \quad (1.75)$$

Après avoir défini les grandeurs radiatives quantitatives mises en jeu dans le bilan d'énergie et présenté les deux modèles à notre disposition, nous allons nous intéresser au solveur 3-D de l'ETR. Dans le chapitre qui suit, nous allons revenir sur les différentes méthodes d'intégration angulaire que l'on nomme quadrature. Le choix de la méthode des ordonnées discrètes nous a conduit à mettre à jour les quadratures existantes et à en implémenter de nouvelles afin de mieux comprendre les problématiques numériques liées à la résolution angulaire et spatiale de l'ETR.

Chapitre 2

Modélisation tridimensionnelle du rayonnement infrarouge

Introduction

*Grâce à eux, eux qui ont reçu le
feu sacré qui permet de tout
voir,
Eux, les machines à observer,
les machines à mettre des mots
sur tout
Eux, qui écrivent plus vite que
la pensée, et avec ça, ils
agrandissent la vie
Ils font apparaître les fils qui
relient toutes les choses entre
elles*

–FAUVE, Cock Music Smart
Music

Jusqu'à présent, les travaux menés sur les problématiques environnementales au sein du CEREAA, en milieu non transparent, utilisaient la modélisation 1-D des transferts radiatifs présentée un peu plus haut. Les résultats de la campagne de mesure ParisFog ont conduit la communauté des chercheurs sur le brouillard radiatif à s'interroger sur les effets des hétérogénéités spatiales sur la formation du brouillard. Par ailleurs, l'article de Hoch et al. (2011) montre l'importance des effets 3-D du rayonnement infrarouge en terrain complexe idéalisé (bassin, vallée) et la nécessité de l'utilisation d'un solveur 3-D pour capter ces effets.

*Une méthode de résolution 3-D de l'ETR nous a donc semblé plus appropriée pour mener à bien cette étude plutôt que l'approximation à deux flux – montant et descendant – du modèle 1-D. **Code_Saturne** dispose également d'un module 3-D radiatif dédié notamment à la modélisation des chaudières. Nous nous sommes donc consacré à l'étude de la faisabilité d'un couplage entre le code radiatif 3-D et la partie thermodynamique de la version atmosphérique de **Code_Saturne**.*

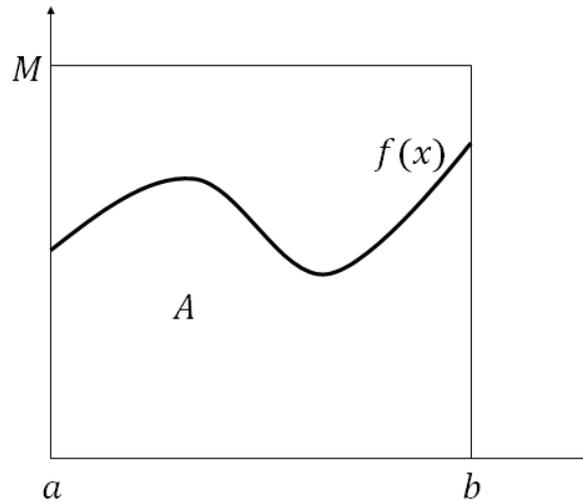
Parmi les solveurs 3-D de l'ETR, nous décrirons brièvement les méthodes couramment utilisées dans la communauté du transfert radiatif en prenant le soin de distinguer les problématiques liées aux applications atmosphériques de celles de la combustion. Nous expliquerons également le choix de la méthode des ordonnées discrètes dans la suite de nos travaux.

Enfin, nous testerons les corrections apportées aux quadratures existantes en nous appuyant sur les récents travaux Gérardin et al. (2012) ainsi que celles nouvellement implantées sur le cas de validation et vérification de **Code_Saturne** grâce aux travaux de Koch and Becker (2004). Ces tests permettront d'illustrer les problématiques rencontrées dans la résolution numérique de l'ETR par la méthode des ordonnées discrètes :

- La diffusion numérique due à l'utilisation du schéma upwind pour l'interpolation de la luminance sur les faces internes du maillage,
- L'effet de rayon dû à la représentation discrète de la variation angulaire de la luminance par les méthodes de quadrature.

Sommaire

2.1	État de l'art sur la résolution 3-D de l'ETR	29
2.1.1	Méthode de Monte Carlo	29
2.1.2	Méthode des Volumes Finis	30
2.1.3	Méthode des Transferts Discrets	30
2.1.4	Méthode des Ordonnées Discrètes	30
2.1.5	Le choix de la méthode des ordonnées discrètes	30
2.2	Les méthodes de quadratures	31
2.2.1	Les quadratures de type S_N	32
2.2.2	Les quadratures de type T_N	33
2.2.3	Les quadratures de type Lebedev-Chebyshev LC_N	34
2.2.4	Les quadratures de type « Double Cyclic Triangle » DCT	34
2.3	Validation des quadratures	34
2.3.1	Résultats	35
2.4	Conclusion	50



2.1 État de l'art sur la résolution 3-D de l'ETR

Dans leur livre, Davis and Marshak (2005) ont donné une définition des Transferts Radiatifs 3-D : « So when we say we are treating 3-D radiative transfer it only means that we are making no assumptions about the translational or rotational symmetry of the optical medium's macro-structure nor about the sources of radiation¹ ». Cette définition a le mérite de clarifier et de classer les applications faisant intervenir le rayonnement. Dans ce chapitre, le qualificatif 3-D est employé pour caractériser la méthode de résolution de l'ETR. Ce sont ces méthodes que nous allons décrire dans les paragraphes suivants :

2.1.1 Méthode de Monte Carlo

La Méthode de Monte Carlo (MMC) est une méthode statistique de calcul numérique d'intégrales introduite par Metropolis and Ulam (1949). On se donne f une fonction continue et positive sur $[a,b]$ et M un majorant de f . Soit $I = \int_a^b f(x)dx$. Soit \mathcal{A} l'ensemble des réels de \mathcal{R}^2 appartenant la surface d'aire I . On va tirer aléatoirement deux nombres ω_1 et ω_2 sur $[a,b]$ et $[0,M]$ N fois. Pour un grand nombre de répétitions indépendantes de cette expérience aléatoire, et en vertu de la loi des grands nombres,

$$P(A) = \frac{\text{nombre de points tels que } (\omega_1, \omega_2) \in \mathcal{A}}{\text{nombre de lancers}},$$

et I n'est rien d'autre que le produit entre $P(A)$ et l'aire du rectangle de dimension $b-a$ et M . Ce principe est utilisé pour la résolution de l'ETR autant pour le calcul des intégrales sur la longueur d'onde, que sur l'angle solide. Les travaux de Roger (2006) détaillent précisément l'utilisation de la MMC pour les transferts radiatifs. Concernant l'application de la méthode aux transferts radiatifs atmosphériques, elle

1. Lorsque nous parlons de transfert radiatif 3-D, cela signifie seulement que nous ne faisons aucune hypothèse de symétrie sur les propriétés optiques du milieu ni sur les sources de rayonnement.

est décrite en détail par Marchuk et al. (1980). Dès lors que les applications radiatives nécessitent le calcul de plusieurs grandeurs radiométriques, les méthodes explicites – en opposition aux méthodes statistiques – de résolution des transferts radiatifs sont moins consommatrices en temps de calcul (Evans, 1998).

Voici à présent les différentes méthodes explicites directionnelles des transferts radiatifs rencontrées dans la littérature.

2.1.2 Méthode des Volumes Finis

La généralisation et l'application de la méthode des volumes finis pour le calcul des transferts radiatifs ont été proposées par Raithby and Chui (1990). Le principe consiste à discrétiser la sphère unité en quadrangles. Comme pour la résolution des équations fluides, on effectue un bilan de luminance sur un « quadrangle de contrôle », comme pour la méthode des volumes finis présentée dans le chapitre 1. En sommant sur l'ensemble des quadrangles, on récupère un système linéaire à résoudre en ayant pris le soin de choisir une relation de fermeture pour la luminance située à la frontière de deux quadrangles.

2.1.3 Méthode des Transferts Discrets

La méthode des Transferts Discrets a été introduite par Lockwood and Shah (1981). Cette méthode consiste à résoudre l'ETR le long d'une série de rayons lancés à partir de chaque face frontière. Contrairement à la méthode de Monte Carlo, les directions de lancer de rayons ne sont pas générées aléatoirement, mais prédéfinies par le choix d'une discrétisation angulaire de l'hémisphère associé à la face frontière. La méthode nécessite cependant le calcul de nombreuses données géométriques qu'il faut stocker ou recalculer à chaque itération (les points d'intersection entre le rayon et la maille pour chaque direction). Son application à une simulation atmosphérique dynamique d'un écoulement à l'échelle locale en milieu bâti semble donc difficilement envisageable.

2.1.4 Méthode des Ordonnées Discrètes

La méthode des ordonnées discrètes propose, quant à elle, de résoudre numériquement l'ETR pour un nombre fini de directions (Chandrasekhar, 1950). Comme pour la méthode des transferts discrets, elle nécessite une discrétisation angulaire mais cette fois-ci de tout l'espace, à savoir des 4π stéradians. Cependant, l'ETR résolue n'est pas sous forme intégrale et ne nécessite pas la connaissance de données géométriques puisqu'il n'y a pas de suivi de rayons.

2.1.5 Le choix de la méthode des ordonnées discrètes

Par construction, la méthode des transferts discrets permet de calculer précisément les flux radiatifs aux parois. Cette problématique est très souvent liée aux problèmes

de combustion (résistance thermique des matériaux). Pour les applications atmosphériques et notamment celles de modélisation de la couche limite nocturne, la connaissance du terme source radiatif et son influence dans l'équation sur la température est nécessaire. Selçuk and Kayakol (1997) ont comparé les méthodes des transferts discrets et celle des ordonnées discrètes sur des enceintes de combustion à géométrie simple. Les conclusions montrent que le calcul du terme source radiatif est beaucoup plus précis avec la méthode des ordonnées discrètes. En outre, le temps calcul est nettement supérieur pour la méthode des transferts discrets.

Selon le type d'application, la nature des transferts radiatifs 3-D est différente. Par conséquent, les méthodes développées pour la résolution de l'ETR et leur efficacité dépendent fortement du type de grandeurs optiques et radiométriques demandées. Pour simuler des écoulements fluides en géométrie complexe avec bâti, la contrainte dominante est le coût calcul représenté par la résolution de l'ETR en regard de celui pour la résolution des équations de Navier-Stokes. L'équation sur le bilan d'énergie interne (réduite à une équation sur la température) nécessite le calcul de la divergence du flux radiatif, qui est bloquant dans la séquence de calcul. Le module de rayonnement de *Code_Saturne* – dédié initialement à la combustion – a donc été construit avec la méthode des ordonnées discrètes pour répondre à cette contrainte.

La mise à jour et l'implémentation de nouvelles quadratures pour utiliser le solveur 3-D de l'ETR et capter les effets radiatifs 3-D en présence de bâti, nous a semblé être une bonne solution.

Considérons à présent, les problématiques soulevées par la nécessité de la discrétisation angulaire, dans la résolution de l'ETR.

2.2 Les méthodes de quadratures

Calculer les grandeurs radiométriques mises en jeu dans le bilan thermique, telles que le flux radiatif et sa divergence, nécessite une intégration sur l'angle solide. Pour ce faire, on utilise communément une quadrature angulaire, permettant de ramener une intégrale sur l'espace angulaire à une somme discrète et pondérée sur un nombre fini de directions. Cette approximation pour une fonction $f(\vec{S})$, s'écrit :

$$\int_{4\pi} f(\vec{S})d\Omega = \sum_{k=1}^N f(\vec{S}_k)\omega_k \quad (2.1)$$

où \vec{S}_k sont les directions discrètes et ω_k les poids directionnels, définis par la quadrature utilisée. Une quadrature consiste à remplacer la fonction f par son polynôme d'interpolation. Dans le cas d'une intégration angulaire, les polynômes sont les harmoniques sphériques. Les poids et les directions sont calculés de telle sorte que l'erreur de la quadrature soit minimisée.

Les méthodes classiques telles que la méthode des Trapèzes ou celle de Simpson peuvent être utilisées pour approcher le calcul des intégrales angulaires. Cependant,

pour une précision suffisante, ces méthodes de discrétisation régulière nécessitent un grand nombre de directions. Sachant que pour une itération du schéma radiatif, il faut résoudre l'ETR autant de fois qu'il y a de directions, ces méthodes ne sont pas utilisées dans le domaine des Transferts Radiatifs.

On leur préfère des méthodes de quadratures telles que celles de Fiveland (1987) et Truelove (1988), Thurgood et al. (1995), Koch et al. (1995) ou encore Lebedev (1976). Les poids ω_k associés aux directions \vec{S}_k doivent satisfaire les moments d'ordre zéro (2.3), un (2.4) et deux (2.6) sur l'espace angulaire, mais aussi le moment hémisphérique d'ordre un (2.5). Chaque direction discrète S_k est définie dans le repère cartésien par :

$$\vec{S}_k = \xi_k \vec{i} + \eta_k \vec{j} + \mu_k \vec{k} \quad (2.2)$$

où $(0, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ est une base orthonormée de \mathcal{R}^3 et μ_k est la projection du vecteur unitaire \vec{S}_k sur l'axe (Oz) . Ainsi défini, μ_k est le cosinus de l'angle zénithal $\theta = (\vec{S}_k, \vec{e}_z)$. L'angle azimuthal ϕ est l'angle compris entre la projection de \vec{S}_k dans le plan (Oxy) et \vec{e}_x . ξ_k est donc égal à $\cos \phi \sin \theta$ et η_k vaut $\sin \phi \sin \theta$.

$$\int_{4\pi} d\Omega = \sum_{k=1}^N \omega_k = 4\pi \quad (2.3)$$

$$\int_{4\pi} \vec{S} d\Omega = \sum_{k=1}^N \vec{S}_k \omega_k = 0 \quad (2.4)$$

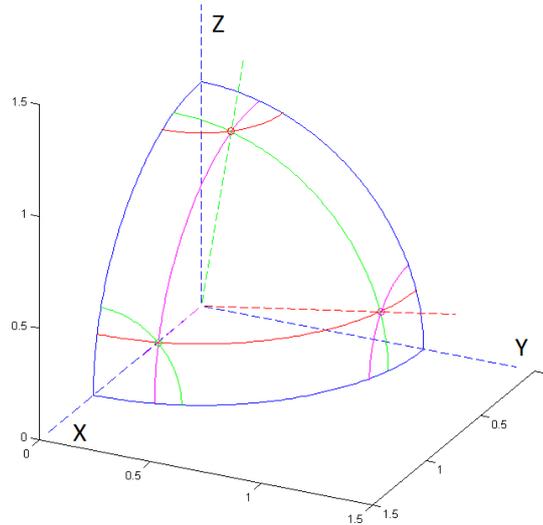
$$\int_{\vec{n} \cdot \vec{S} < 0} |\vec{n} \cdot \vec{S}| d\Omega = \int_{\vec{n} \cdot \vec{S} > 0} \vec{n} \cdot \vec{S} d\Omega = \sum_{\vec{S}_k \in \{\vec{S}_k \cdot \vec{n} > 0\}} \vec{n} \cdot \vec{S}_k \omega_k = \pi \quad (2.5)$$

$$\int_{4\pi} \mu^2 d\Omega = \sum_{k=1}^N \vec{S}_k \cdot \vec{S}_k \omega_k = \frac{4\pi}{3} \quad (2.6)$$

Les méthodes de quadratures, utilisées dans la méthode des ordonnées discrètes, ont été développées dans les codes de transport neutronique par Carlson et al. (1965). Les travaux de Fiveland (1987) ont étendu les applications des quadratures à la résolution de l'ETR. En s'appuyant sur les travaux de Koch and Becker (2004), une présentation des différents types de quadratures est faite dans le paragraphe suivant.

2.2.1 Les quadratures de type S_N

Cette quadrature est définie par N_d directions discrètes où $N_d = N(N + 2)$ (N étant l'ordre de la quadrature). Sa construction est régie par des règles de symétrie établies par Carlson et al. (1965), Fiveland (1987) et Truelove (1988), répondant

FIGURE 2.1 – Représentation d'un octant pour la quadrature S_4

à une invariance pour toute rotation de $\frac{\pi}{2}$, afin de ne privilégier aucun sens de propagation du rayonnement. Les directions et les poids sont donc calculés sur un octant (figure 2.1) et déduits ensuite par symétrie sur les sept autres octants de la sphère unité. \vec{S}_k étant un vecteur unitaire, ses coordonnées cartésiennes vérifient la relation suivante :

$$\xi_k^2 + \eta_k^2 + \mu_k^2 = 1 \quad (2.7)$$

La relation que doivent vérifier les composantes des vecteurs \vec{S}_k a été donnée par Carlson et al. (1965). Cette relation, à laquelle doivent obéir les composantes ξ_k , η_k et μ_k , est la suivante :

$$x_k^2 = x_1^2 + 2(1 - 3x_1^2) \frac{k-1}{N-2}, \quad (2.8)$$

pour x_k égal à ξ_k , η_k et μ_k avec $k \in [1, N_d!]$ et x_1 étant la première composante choisit arbitrairement. Ces quadratures sont les plus utilisées que ce soit pour toutes les applications du rayonnement utilisant la méthode des ordonnées discrètes ou celles utilisant les codes de neutronique pour lesquels les quadratures S_N ont initialement été développées.

2.2.2 Les quadratures de type T_N

La quadrature T_N , introduite par Thurgood et al. (1995) est définie par construction géométrique. Le principe est de découper l'octant en triangles sphériques. Le triangle dont les sommets sont $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$ (figure 2.2) est subdivisé en petits triangles équilatéraux. Ces triangles et leur centre de gravité sont projetés sur la sphère unité où sont situées les ordonnées discrètes. Les poids sont calculés en fonction de l'aire de la surface projetée des triangles sphériques contenant les ordonnées discrètes. Ce découpage de la sphère génère $Nd = 8N^2$ directions discrètes où N est le nombre de subdivisions de l'arête du triangle principal.

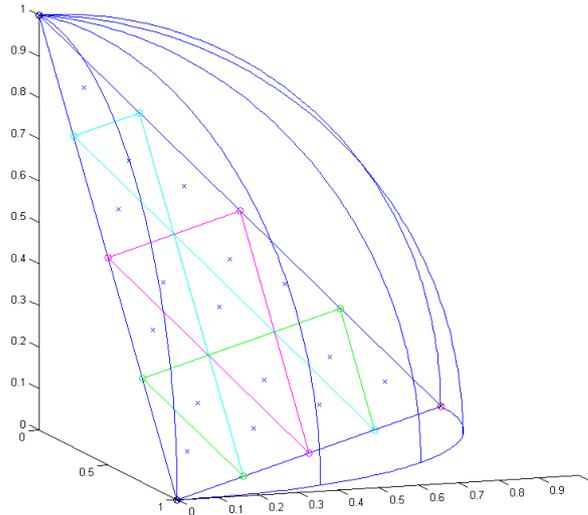


FIGURE 2.2 – Représentation d'un octant pour la quadrature T_4

Une famille de quadratures utilisant la même construction géométrique est proposée par Rukolaine and Yuferev (2001). Cette fois-ci, les ordonnées discrètes sont placées sur les sommets des petits triangles. Initialement dans *Code_Saturne*, seules les quadratures de type T_N pour $N = 2$ et $N = 4$ étaient implémentées.

2.2.3 Les quadratures de type Lebedev-Chebyshev LC_N

Lebedev (1976) a développé des quadratures capables d'intégrer les harmoniques sphériques d'ordre très élevé. A en croire leur nom, les coordonnées des sommets assurant la discrétisation de l'octant sont obtenues à l'aide des polynômes de Chebyshev.

2.2.4 Les quadratures de type « Double Cyclic Triangle » DCT

Koch et al. (1995) ont identifié dans la construction des quadratures, une contrainte non nécessaire, qui restreignait a priori le nombre de degrés de liberté dans les choix des latitudes et des poids des quadratures S_N . Les quadratures $DCTxyz - abcd$ (Double Cyclic Triangle) sont une extension des quadratures S_N . a, b, c et d désignent les moments satisfaits par la quadrature et x, y et z l'ordre de dégénération du tuple (ξ_k, η_k, μ_k) . Le lecteur pourra se référer à l'article de Koch and Becker (2004) pour des explications approfondies sur la construction de ces quadratures.

2.3 Validation des quadratures

Cette section est destinée à présenter les différents résultats obtenus après correction des quadratures de type T_N pour $N = 2, 4$, (32 et 128 directions), et implémentation des quadratures de type S_N pour $N = 4, 6, 8$, (24, 48, 80 directions), de type LC_N pour $N = 15$, (120 directions) et enfin des quadratures de type DCT pour $N = 6$, (48 directions) dans *Code_Saturne*.

TABLE 2.1 – Quadratures existantes et nouvelles dans **Code_Saturne**

quadratures	T_2	T_4	T_N	S_4	S_6	S_8	LC_{15}	DCT
nombre de directions	32	128	$8N^2$	24	48	80	120	48
existante (Martin, 1992)	✓	✓						
nouvelle (Gérardin et al., 2012)			✓	✓	✓	✓		
nouvelle (Collin, 2003)							✓	✓

Pour ce faire, nous nous sommes appuyé sur les travaux de Gérardin et al. (2012) et de Collin (2003). Ce dernier a effectué une comparaison entre certaines méthodes de quadrature et a mis à disposition des lecteurs les valeurs des noeuds et des poids des quadratures $LC - 15$ et $DCT020 - 2468$. **Code_Saturne** disposait de deux quadratures de type T_2 et T_4 dont nous avons corrigé les poids ω_k . Ceux-ci étaient calculés à partir de considérations géométriques (Martin, 1992) et nous les avons remplacés par ceux de Thurgood et al. (1995).

Par ailleurs, l'augmentation du nombre de directions discrètes augmente mécaniquement le temps calcul. Pour les études industrielles – combustion dans les chaudières, écoulement atmosphérique en milieu bâti ou sécurité incendie –, les transferts radiatifs sont couplés à un code de CFD (Computational Fluid Dynamics). Les calculs radiatifs étant extrêmement coûteux du fait du nombre d'équations de transport à résoudre, le nombre de directions n'excède que très rarement 80 (S_8). C'est donc dans ce contexte que nous avons ajouté les quadratures S_4 , S_6 , S_8 , LC_{15} et $DCT020 - 2468$ pour permettre à l'utilisateur de disposer de quadratures offrant un bon compromis entre précision et temps de calcul.

2.3.1 Résultats

2.3.1.1 Comparaison avec le cas SELÇUK

Lors de l'implémentation, dans **Code_Saturne**, de la méthode des ordonnées discrètes, Douce and Méchitoua (2004) ont mis en place deux cas de validation issus de (Selçuk, 1985; Selçuk and Tahiroglu, 1988). Dans ces articles, les expressions analytiques du terme source radiatif et de la densité de flux radiatif sont proposées dans des fours de formes géométriques simples, contenant un milieu semi-transparent non diffusant. Ce milieu semi-transparent est un gaz dont on impose la température.

La première chambre de combustion est un parallélépipède tandis que la seconde est cylindrique. Dans les deux cas, on se placera dans le cadre des hypothèses suivantes :

1. les fours sont considérés comme des enceintes de surfaces noires, séparées par un milieu semi-transparent non diffusant constitué d'un gaz gris ;
2. le coefficient d'absorption du milieu est constant dans toute l'enceinte ;
3. la distribution de température du gaz est imposée de façon à être symétrique par rapport à l'axe (Oz) du four ;
4. les luminances aux parois sont imposées comme conditions aux limites du problème.

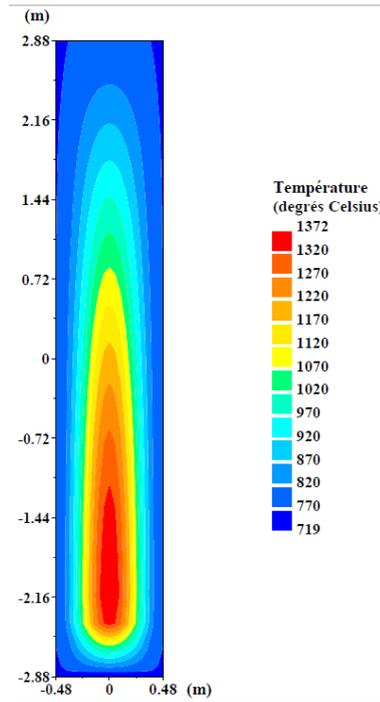


FIGURE 2.3 – Température du milieu gazeux dans le four parallélépipédique (degrés Celsius) (Douce and Méchitoua, 2004)

Dans chaque cas, nous avons comparé les termes sources semi-analytiques, conservatifs et semi-analytiques corrigés, sortis du module radiatif trimensionnel de *Code_Saturne*, avec la solution analytique. Les termes sources ainsi que le flux incident à la paroi ont été adimensionnés. Dans ce système de coordonnées adimensionnées par la largeur du four, les dimensions de l'enceinte parallélépipédique deviennent $1 \times 1 \times 12$. Nous appellerons respectivement S_0 et Q_0 le terme source radiatif et le flux incident à la paroi considérée.

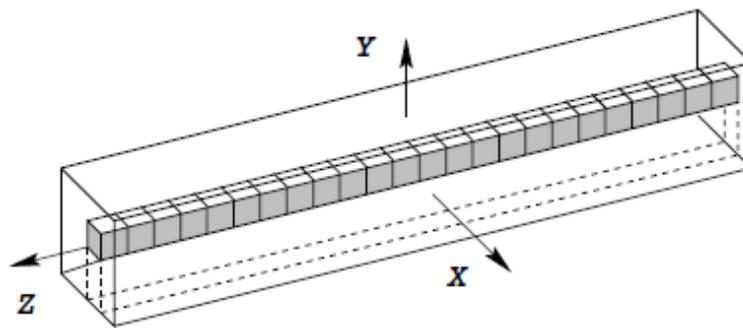
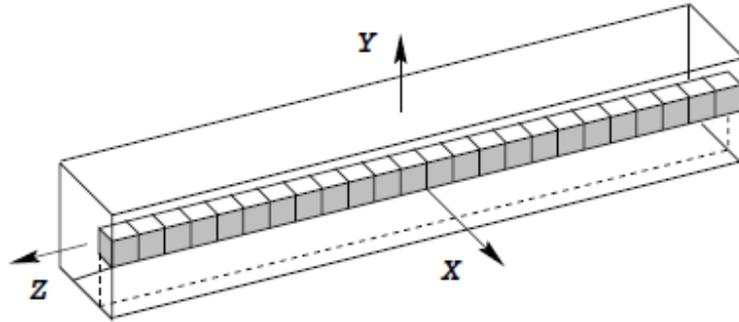
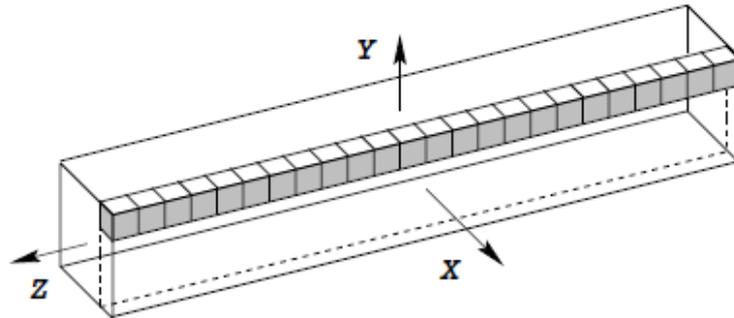
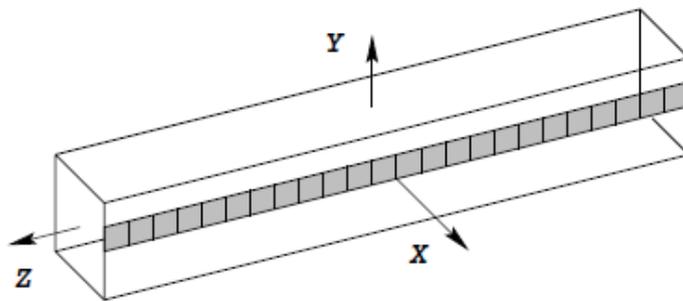
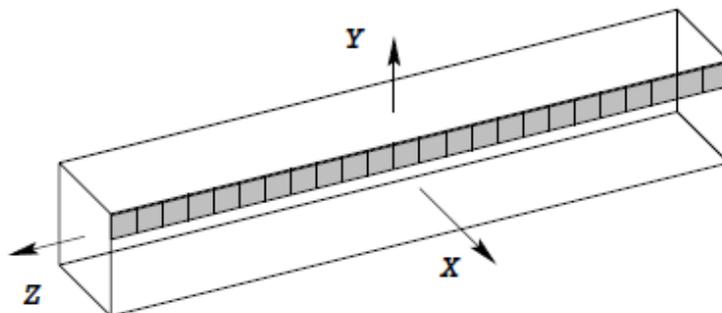


FIGURE 2.4 – Support du profil $x_0 = 0.25$ et $y_0 = 0.25$ pour le terme source radiatif

Les profils pour le terme source sont les colonnes de cellules grisées sur les figures 2.4, 2.5 et 2.6. Pour le flux incident à la paroi, les profils sont les faces grisées sur les figures 2.7 et 2.8.

FIGURE 2.5 – Support du profil $x_0 = 0.75$ et $y_0 = 0.25$ pour le terme source radiatifFIGURE 2.6 – Support du profil $x_0 = 0.75$ et $y_0 = 0.75$ pour le terme source radiatifFIGURE 2.7 – Support du profil $x_0 = 1.0$ et $y_0 = 0.25$ pour le flux incident à la paroiFIGURE 2.8 – Support du profil $x_0 = 1.0$ et $y_0 = 0.75$ pour le flux incident à la paroi

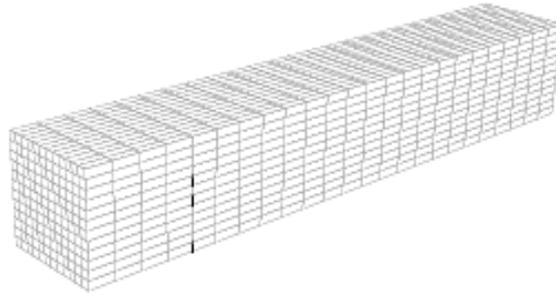


FIGURE 2.9 – Maillage de l'enceinte parallélépipédique : 3456 cellules

Voici l'allure des profils obtenus pour les quadratures T_2 et T_4 . Les légendes « ideriv » 0, 1 et 2 correspondent respectivement aux termes sources semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR).

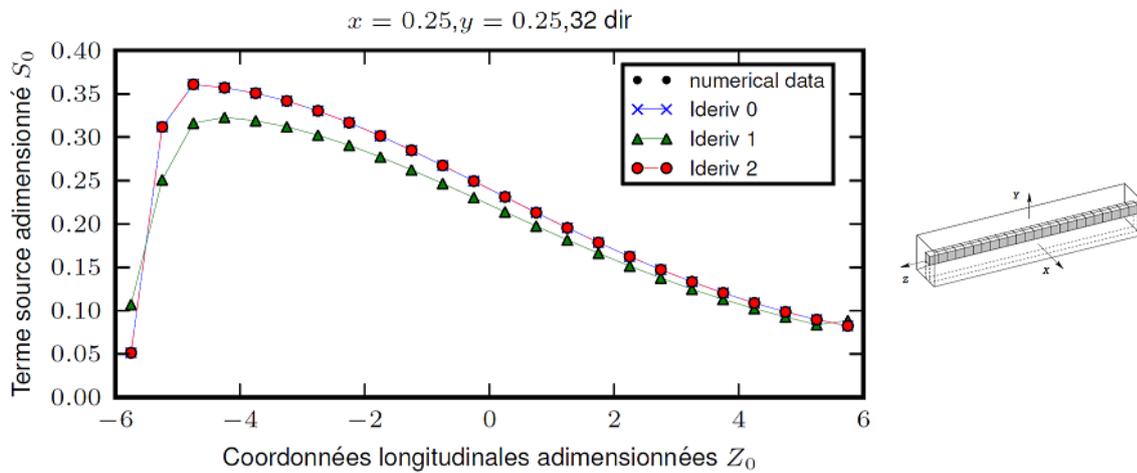


FIGURE 2.10 – Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.25$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes

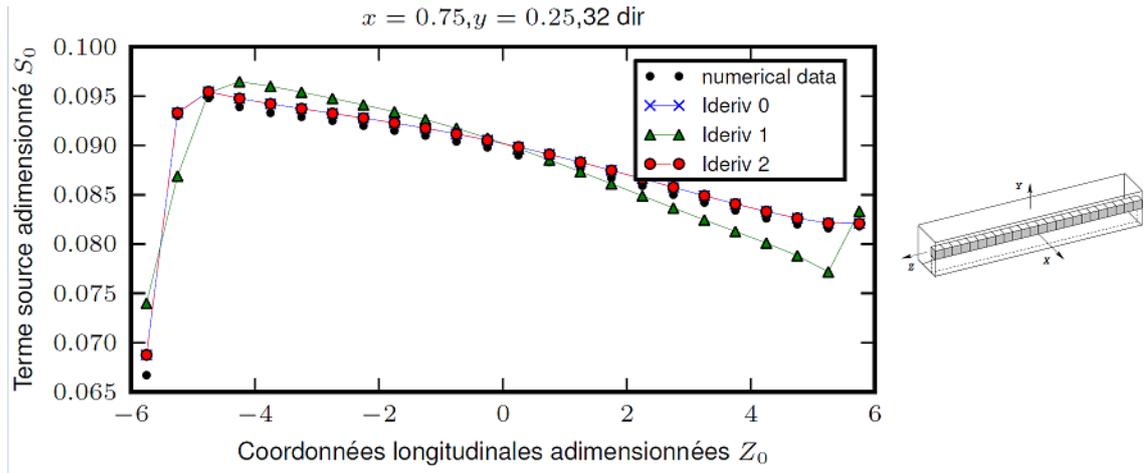


FIGURE 2.11 – Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.75$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes

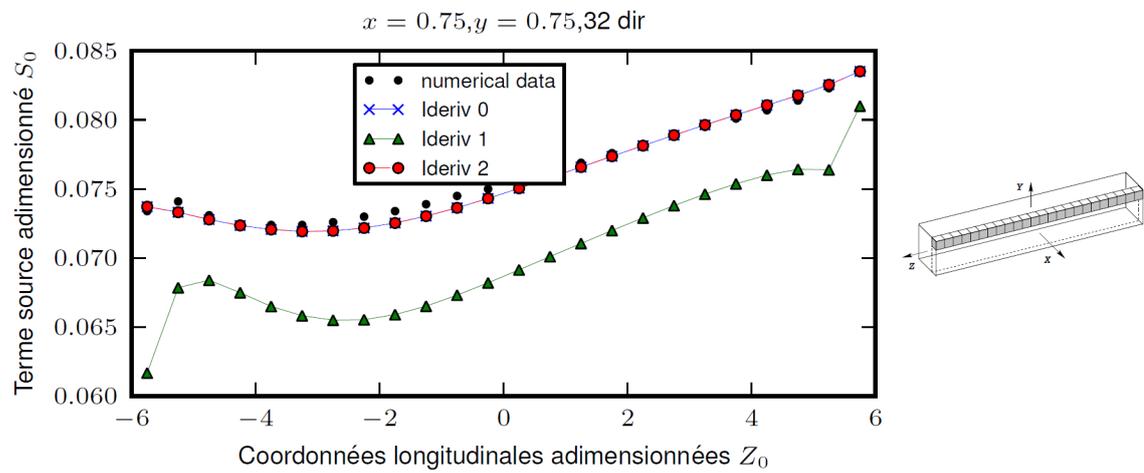


FIGURE 2.12 – Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, cellules intérieures du gaz : $x_0 = 0.75$ $y_0 = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes

Afin de comparer les quadratures modifiées à celles initialement implémentées, nous avons calculé l'écart relatif entre les résultats de la simulation et la solution exacte. Cet écart est calculé pour le terme source S_0 et le flux incident Q_0 avec les expressions suivantes :

$$\Delta S_0 = \frac{\sum_{k=1}^{N_{\text{cellule}}} |S_{0,k}^{\text{Saturne}} - S_{0,k}^{\text{exact}}|}{\sum_{k=1}^{N_{\text{cellule}}} |S_{0,k}^{\text{exact}}|} \quad \Delta Q_0 = \frac{\sum_{k=1}^{N_{\text{face}}} |Q_{0,k}^{\text{Saturne}} - Q_{0,k}^{\text{exact}}|}{\sum_{k=1}^{N_{\text{face}}} |Q_{0,k}^{\text{exact}}|}$$

Dans ces expressions 4.10 et 4.11, les sommes sont établies sur tous les éléments de

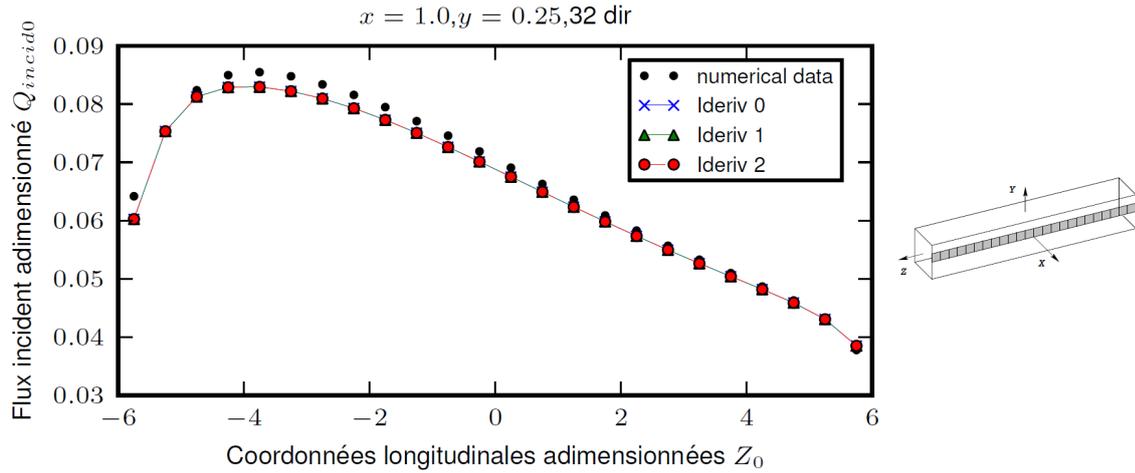


FIGURE 2.13 – Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, faces de bord : $x_0 = 1.0$ $y_0 = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes

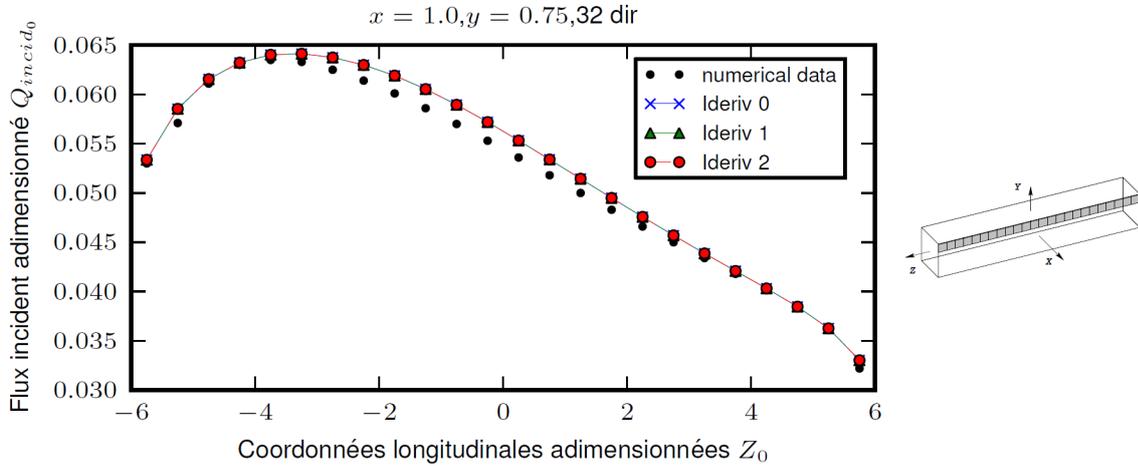


FIGURE 2.14 – Comparaison entre les valeurs exactes et les prédictions des modèles, faces de bord : $x_0 = 1$ $y_0 = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes

chaque maillage dont on connaît les solutions analytiques, soit parce qu'elle sont fournies par l'énoncé du cas, soit par déduction en utilisant les symétries du problème.

Les résultats ci-dessus présentent pour le terme source semi-analytique, un écart relatif ΔS_0 qui est inférieur à 1%, quelle que soit la quadrature utilisée. La méthode de calcul semi-analytique est donc très satisfaisante. Cependant, lorsque l'on intègre la relation (1.13) sur un domaine de volume V de frontière ∂V , il vient que :

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = \int_V -\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}} dV = \int_{\partial V} -\vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n} d\sigma \quad (2.9)$$

où \vec{n} est la normale à la surface ∂V . L'expression $\vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n}$ est, par définition, la densité de flux net radiatif Q_{net} . La conservation de l'énergie radiative pour le volume V implique :

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = - \int_{\partial V} Q_{\text{net}} d\sigma \quad (2.10)$$

Maillage : 3456 cellules	T2			T4		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.63 (0.37)	9.70 (9.44)	0.63 (3.39)	0.52 (0.47)	8.51 (8.73)	0.52 (1.15)
$\Delta Q_0(\%)$	2.03 (4.24)			2.67 (2.47)		
Maillage : 9600 cellules	T2			T4		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.61 (0.49)	7.16 (6.69)	0.61 (3.35)	0.40 (0.37)	6.02 (6.19)	0.40 (1.06)
$\Delta Q_0(\%)$	2.17 (4.24)			2.02 (4.00)		

TABLE 2.2 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures T_2 et T_4 avec entre parenthèses, les erreurs relatives avant correction des poids

Or, dans notre cas, $\int_V S_{\text{rad}} dV = -5.6.10^5 W$ et $-\int_{\partial V} Q_{\text{net}} d\sigma = 5.8.10^5 W$. La relation (2.9) n'est pas vérifiée et le bilan d'énergie radiative n'est donc pas respecté.

Lorsqu'on s'intéresse aux écarts obtenus avec la méthode conservative, on remarque une dégradation de la précision des résultats. En effet, l'erreur relative avec le terme source radiatif est de l'ordre de 9% contre 1% pour la méthode semi-analytique. Cela s'explique par le fait que \vec{Q}_{rad} subit une discrétisation angulaire supplémentaire, dont le nombre de directions discrètes ne suffit pas pour atteindre la précision obtenue avec la méthode semi-analytique. C'est pourquoi la méthode semi-analytique a été modifiée pour la rendre conservative. Ainsi, le bilan global d'énergie est respecté.

Le même travail a été réalisé sur ce cas pour les quadratures S_N , $DCT020 - 2468$ et $LC - 15$:

Maillage : 3456 cellules	S4			S6			S8		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.59	9.37	0.59	0.38	8.10	0.38	0.93	9.22	0.93
$\Delta Q_0(\%)$	3.58			3.63			2.59		
Maillage : 9600 cellules	S4			S6			S8		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.55	6.90	0.55	0.29	5.69	0.29	0.86	6.86	0.86
$\Delta Q_0(\%)$	3.36			3.28			2.19		

TABLE 2.3 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures S_4 , S_6 et S_8

Voyons à présent comment se comporte le module radiatif avec un maillage qui présente des non-orthogonalités. C'est l'objet du deuxième test sur une géométrie cylindrique dont le maillage est représenté sur la figure 2.15.

Maillage :	<i>DCT020 – 2468</i>			<i>LC – 15</i>		
3456 cellules	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.19	8.69	0.19	0.47	7.89	0.47
$\Delta Q_0(\%)$	1.61			4.14		
Maillage :	<i>DCT020 – 2468</i>			<i>LC – 15</i>		
9600 cellules	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	0.25	6.03	0.25	0.60	5.37	0.60
$\Delta Q_0(\%)$	1.15			4.12		

TABLE 2.4 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif semi-analytique (SA), conservatif (CONS) et semi-analytique corrigé (CORR) et le flux incident pour les quadratures *DCT020 – 2468* et *LC – 15*

Pour le réaliser, nous avons utilisé deux maillages de tailles respectives 9360 et 54400 cellules.

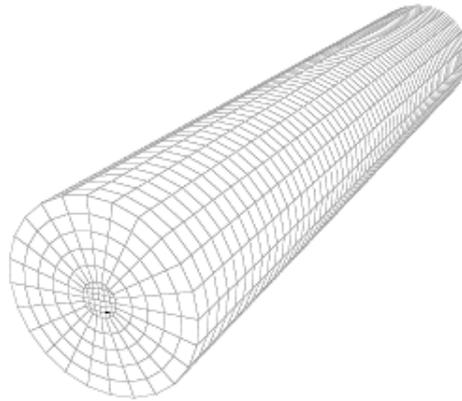


FIGURE 2.15 – Maillage de l'enceinte cylindrique : 9360 cellules

Ces maillages ne présentent pas d'angle de non-orthogonalité de plus de 45° . Les profils adimensionnés du terme source radiatif et du flux incident sont repérés par le rayon adimensionné de l'enceinte :

– $r = 0.25$

– $r = 0.75$

pour S_0 .

– $r = 1.0$

pour Q_0 .

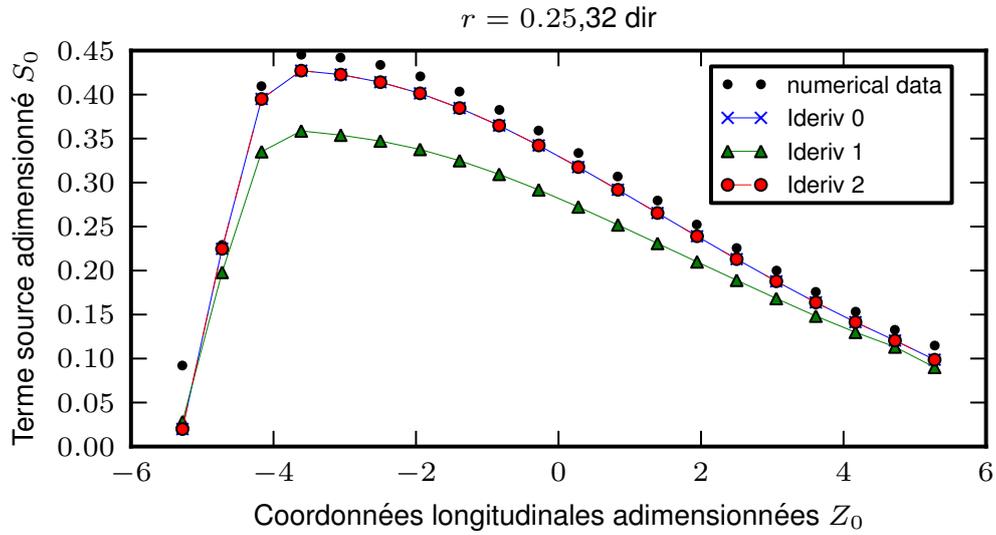


FIGURE 2.16 – Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.25$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes)

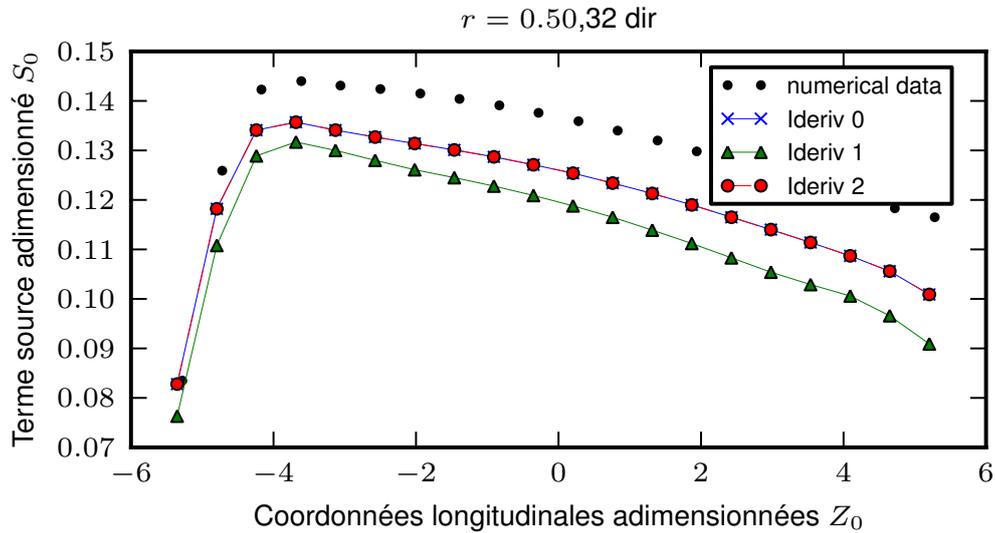


FIGURE 2.17 – Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.75$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes)

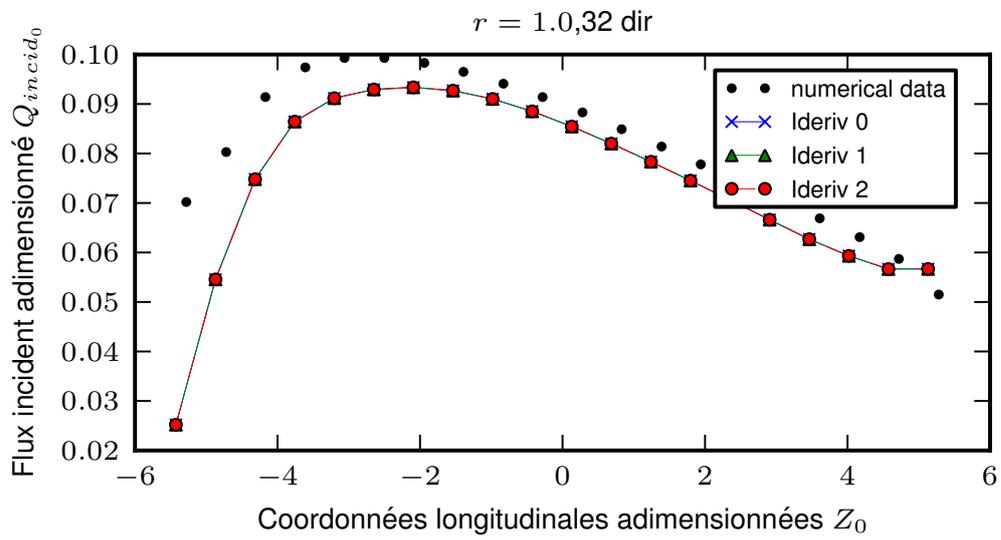


FIGURE 2.18 – Comparaison entre la solution analytique et les prédictions des modèles (cellules intérieures du gaz : $r = 0.1.0$, maillage 3456 cellules, 32 directions discrètes)

Maillage : 9360 cellules	T2			T4		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	7.51 (6.85)	17.76 (17.18)	7.52 (7.18)	7.27 (7.29)	17.16 (17.51)	7.27 (7.18)
$\Delta Q_0(\%)$	12.19 (11.22)			11.60 (11.59)		

Maillage : 54400 cellules	T2			T4		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	7.51 (6.04)	17.54 (9.44)	7.52 (6.16)	7.26 (6.48)	17.16 (9.88)	7.27 (6.34)
$\Delta Q_0(\%)$	12.33 (10.42)			11.69 (10.93)		

TABLE 2.5 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures T2 et T4

Maillage : 9360 cellules	S4			S6			S8		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	7.212	17.63	7.212	7.02	17.16	7.02	7.72	17.81	7.72
$\Delta Q_0(\%)$	13.42			11.11			12.45		

Maillage : 54400 cellules	S4			S6			S8		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
$\Delta S_0(\%)$	7.210	17.30	7.210	7.01	16.95	7.01	7.71	17.59	7.71
$\Delta Q_0(\%)$	13.35			11.19			12.50		

TABLE 2.6 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures S4, S6 et S8

Les résultats confirment les tendances qui se dégagent du cas précédent, à savoir une bonne précision du calcul du terme source radiatif pour les méthodes semi-analytique et semi-analytique corrigée, et une baisse de celle-ci pour la méthode conservative. On constate, par ailleurs, que le raffinement de la discrétisation spatiale ne réduit pas significativement les écarts relatifs entre la solution pseudo-analytique et la sortie du modèle DOM.

Concernant la discrétisation angulaire, celle-ci n'a que très peu d'influence sur la précision. Nous pouvons penser que les erreurs numériques induites par les non-orthogonalités du maillage, l'effet de rayon de la méthode des ordonnées discrètes ainsi que la diffusion numérique – induite par l'utilisation du schéma upwind pour l'interpolation de la luminance aux faces internes – masquent complètement le gain de précision obtenue en augmentant le nombre de directions discrètes. Concernant les deux dernières raisons évoquées ci-avant, Chai et al. (1993) ont effectué différents tests pour isoler ces effets et les analyser. Les conclusions sont les suivantes :

– **Effet de rayon :**

1. L'effet de rayon est une conséquence de la discrétisation angulaire et est indépendant de la discrétisation spatiale. Si le schéma upwind préserve les discontinuités sur le champ de luminance, le schéma diamond – la

Maillage :	DCT020-2468			LC15		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
9360 cellules						
$\Delta S_0(\%)$	6.92	17.08	6.93	6.48	16.58	6.48
$\Delta Q_0(\%)$	11.08			10.70		
Maillage :	DCT020-2468			LC15		
	SA	CONS	CORR	SA	CONS	CORR
54400 cellules						
$\Delta S_0(\%)$	6.92	16.87	6.92	6.46	16.38	6.46
$\Delta Q_0(\%)$	11.22			10.81		

TABLE 2.7 – Écart relatif entre le calcul et les valeurs exactes pour le terme source radiatif et le flux incident pour les quadratures DCT020-2468 et LC15

luminance à la face est donnée par la demi-somme des luminances des cellules qui jouxtent la face – produit des oscillations numériques près des frontières.

2. Même si nous disposons de solutions analytiques de l'ETR sur chaque direction discrète, l'effet de rayon provoque des sauts numériques sur le champ de luminance et le flux radiatif (résultats du cas du parallélépipède et du cylindre de Selçuk (1985); Selçuk and Tahiroglu (1988)).
3. L'effet de rayon peut conduire à des solutions lisses mais non physiques.
4. L'utilisation de schéma d'interpolation de la luminance à la face autre que l'UPWIND peut créer des oscillations numériques supplémentaires.

– **Diffusion numérique :**

1. La diffusion numérique est un phénomène existant dans les problèmes multi-dimensionnels qui n'a pas d'équivalent en 1-D.
2. Pour des grilles alignées selon les rayons, il n'y a pas de diffusion numérique.
3. Dès lors que les directions discrètes ne sont pas alignées avec le maillage, le schéma upwind produit de la diffusion numérique. Un clipping des valeurs de la luminance dans le schéma diamond peut diminuer la diffusion mais peut créer des oscillations numériques supplémentaires.
4. Si la diffusion numérique lisse les solutions obtenues, elle n'élimine en aucun cas l'effet de rayon.

2.3.1.2 Comparaison avec le cas SAKAMI

Ce travail effectué sur les quadratures a également permis l'ajout d'un nouveau cas test, celui de Malalasekera and James (1996) avec sa cavité en « L » figure 2.19 repris par Sakami et al. (1998).

Cette géométrie est intéressante car elle présente des zones dites « cachées ». Certaines parties de la cavité ne peuvent rayonner directement l'une vers l'autre. Dans l'optique de pouvoir simuler les transferts radiatifs en terrain complexe, ce cas d'étude permet d'identifier d'éventuels points bloquants. Comme précédemment, le milieu est purement absorbant à une température de $1000K$, bordé par des parois noires à $500K$. Les simulations sont faites pour 5 valeurs de coefficient d'absorption

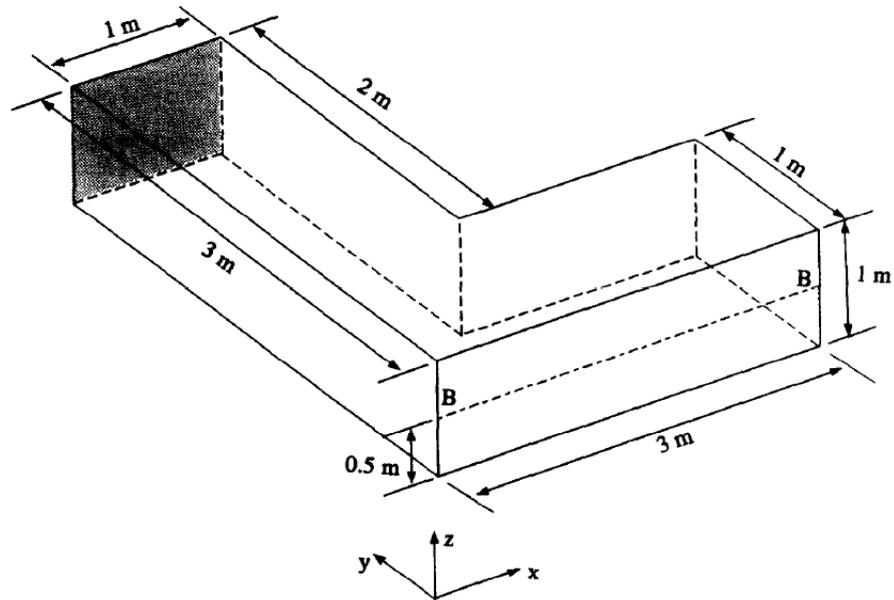


FIGURE 2.19 – Cavité en L

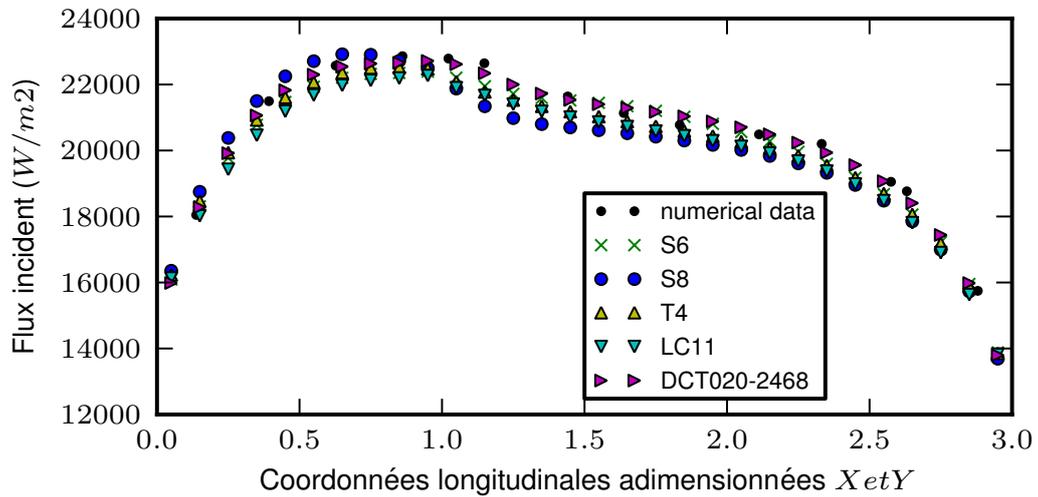


FIGURE 2.20 – Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et **Code_Saturne** ; support du profil : $y = 0, z = 0.5$; $k = 0.5m^{-1}$

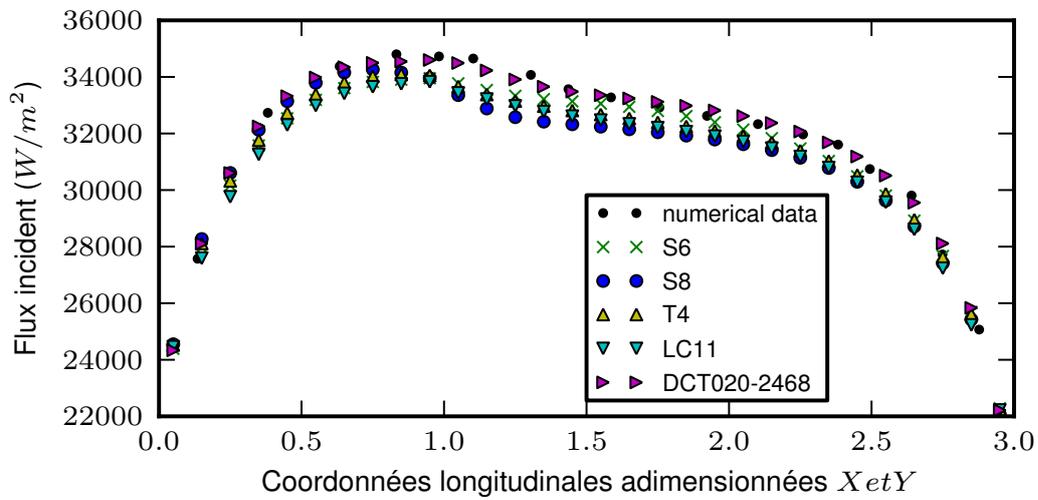


FIGURE 2.21 – Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et **Code_Saturne** ; support du profil : $y = 0, z = 0.5$; $k = 1.0 \text{ m}^{-1}$

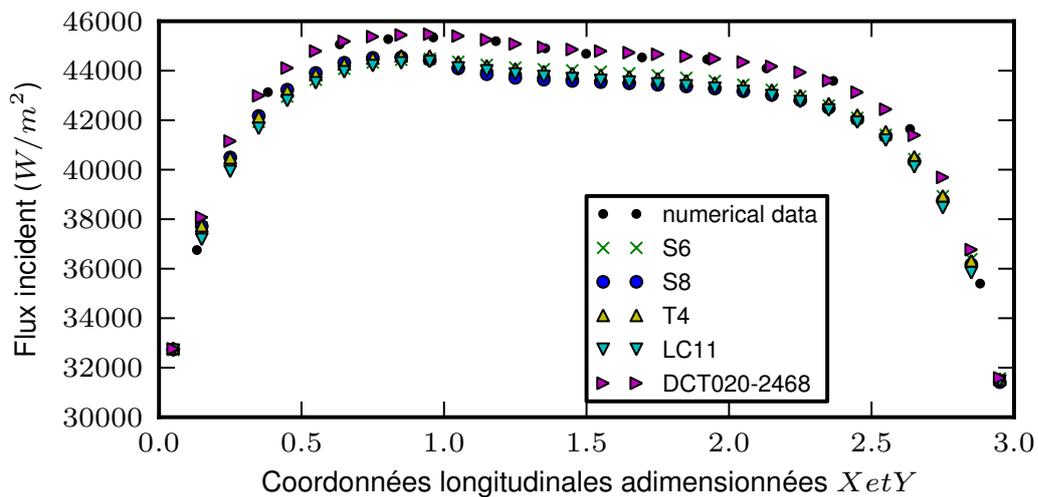


FIGURE 2.22 – Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et **Code_Saturne** ; support du profil : $y = 0, z = 0.5$; $k = 2.0 \text{ m}^{-1}$

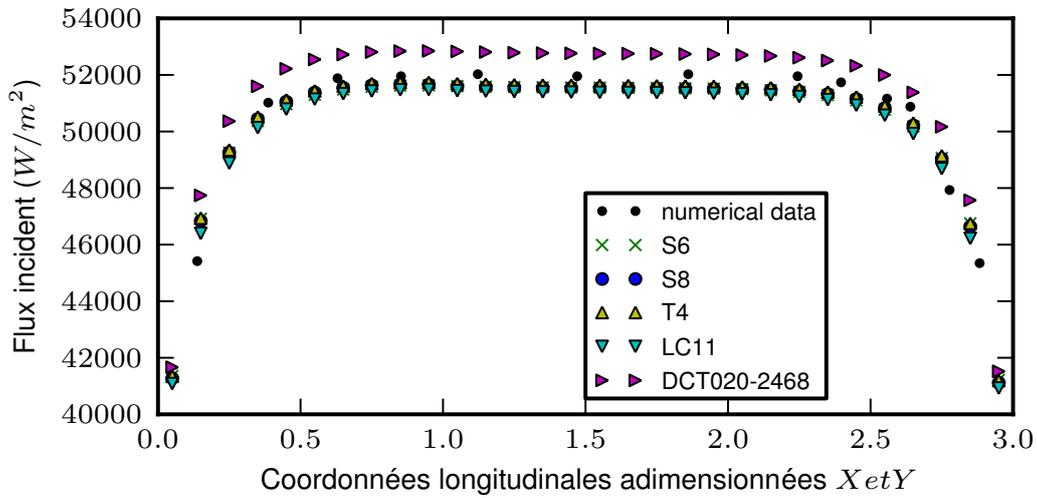


FIGURE 2.23 – Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et **Code_Saturne** ; support du profil : $y = 0, z = 0.5$; $k = 5.0m^{-1}$

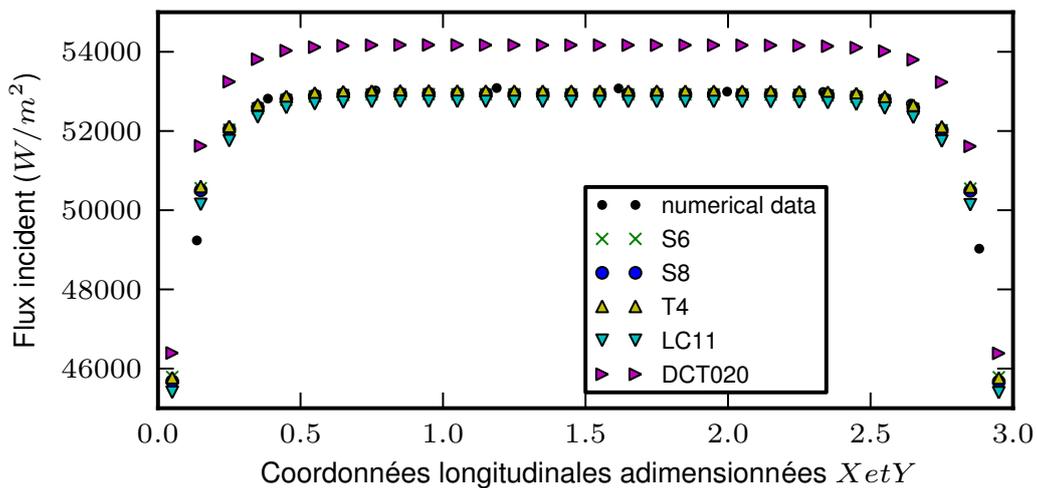


FIGURE 2.24 – Profil du flux incident à la paroi : comparaison entre les résultats obtenus par Sakami et al. (1998) et **Code_Saturne** ; support du profil : $y = 0, z = 0.5$; $k = 10.0m^{-1}$

constant. Les résultats obtenus sont tracés sur les figures 2.20, 2.21, 2.22, 2.23 et 2.24.

Au vu des résultats, une quadrature se distingue des autres, celle développée par Koch et al. (1995). Pour des milieux optiquement fins, la $DCT020 - 2468$ donne les meilleurs résultats sur le flux reçu à la paroi. En revanche, pour des milieux fortement absorbants ($k \geq 5.0m^{-1}$) elle surestime quelque peu le flux. Dans nos applications atmosphériques, le coefficient d'absorption moyen n'excède pas $0.5m^{-1}$. Il semble donc que la quadrature $DCT020 - 2468$ soit une bonne candidate à la discrétisation angulaire. Il faut néanmoins considérer que la précision des flux incidents aux parois est moins importante que celle du terme source radiatif. Les résultats obtenus sur le cas parallélépipédique de Selçuk (1985) confirment le bon comportement de la quadrature $DCT020 - 2468$ mais également celui de la LC_{15} et des S_N .

2.4 Conclusion

Ces différents tests ont conduit à des résultats quelque peu surprenants. En effet, si l'on s'intéresse de plus près au cas cylindrique de Selçuk and Tahiroglu (1988), on remarque que le raffinement de maillage n'a quasiment aucune influence sur les résultats. Pire, les résultats sur le flux incident se dégradent pour les quadratures T_2 , T_4 et S_6 et S_8 . Ce problème a déjà été soulevé par Chai et al. (1993) et leur conclusion confirme les résultats obtenus : pour une discrétisation donnée, le raffinement de maillage augmente l'effet de rayon. Ainsi, l'augmentation de précision attendue dans la résolution spatiale de l'ETR se retrouve masquée par l'augmentation des erreurs dues aux effets de rayon. Une autre conclusion importante de leur article est l'augmentation de l'effet de rayon dans les milieux optiquement fins.

Pour augmenter la précision des calculs, il faut non seulement raffiner le maillage, mais également la discrétisation angulaire. Le choix d'une quadrature dépend donc du type de problème rencontré. Avant d'exclure une quadrature, nous effectuerons une étude de sensibilité de la discrétisation angulaire sur un cas atmosphérique, à savoir dans un milieu optiquement fin.

Chapitre 3

Modélisation de l'absorption infrarouge dans l'atmosphère

Introduction

Tu te demandes si tu es une bête féroce ou bien un Saint, mais tu es l'un et l'autre, et tellement de choses encore.

Tu es infiniment nombreux; celui qui méprise, celui qui blesse, celui qui aime, celui qui cherche, comme tous les autres ensemble. Trompe-toi, sois imprudent.

Tout n'est pas fragile, n'attends rien que de toi, parce que tu es sacré, parce que tu es en vie.

Parce que le plus important n'est pas ce que tu es mais ce que tu as choisi d'être.

–FAUVE, Blizzard

Quelles que soient les applications nécessitant une description des transferts radiatifs en milieu participatif (agents gazeux, particules), le modèle des propriétés radiatives utilisé dépend des conditions thermodynamiques. Les variations spatiales du champ de température et de pression mais également des concentrations des différents gaz atmosphériques complexifient la modélisation de l'absorption. Il existe deux façons de formuler l'ETR, qui conditionnent la modélisation de l'absorption et de l'émission (la diffusion étant négligée dans le cadre de notre travail) :

- La forme différentielle :

$$\left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}\right) I_\lambda(s, \vec{S}) = -k_\lambda I_\lambda(s, \vec{S}) + k_\lambda I_\lambda^o(s) \quad (3.1)$$

- La forme intégrale tirée de (Tessé and Lamet, 2011) :

$$I_\lambda(s, \vec{S}) = I_\lambda(s_p, \vec{S}) \mathcal{T}_\lambda(s_p, s) + \int_{s_p}^s k_\lambda I_\lambda^o(s') \mathcal{T}_\lambda(s', s) ds' \quad (3.2)$$

où $\mathcal{T}_\lambda(s', s)$ est la transmittivité monochromatique définie dans le chapitre 1 :

$$\mathcal{T}_\lambda(s', s) = \exp\left(-\int_{s'}^s k_\lambda(s'') ds''\right) \quad (3.3)$$

Ainsi, selon la forme de l'ETR, nous devons considérer le coefficient d'absorption k_λ ou la transmittivité $\mathcal{T}_\lambda(s', s)$ pour résoudre cette équation. Si k_λ est une grandeur locale, \mathcal{T}_λ ne l'est pas. Dans la section suivante, nous allons décrire les différents modèles utilisés dans les transferts radiatifs pour intégrer l'ETR sur la longueur d'onde (ou la fréquence). Nous nous attarderons ensuite sur le modèle en émissivité utilisé par **Code_Saturne 1D**, ainsi que son adaptation au solveur radiatif 3-D de l'ETR grise.

Sommaire

3.1	Quelques principes physiques qui régissent les phénomènes d'absorption, d'émission et de diffusion	53
3.1.1	Un seul quantum de mécanique quantique pour expliquer. . .	53
3.2	Les quatre familles de modèles de propriétés radiatives	54
3.2.1	Calculs Raie Par Raie - Line-By-Line Calculations (LBL)	54
3.2.2	Modèle à bandes étroites - Narrow Band Models	54
3.2.3	Modèle à bandes larges - Wide Band Models	55
3.2.4	Modèle à bandes étroites et larges - k-distributions et Correlated K-Distributions	55
3.2.5	Modèles globaux - Full spectrum	56
3.2.6	Modèle gaz gris ou en émissivité - Broadband emissivity-flux scheme	56
3.3	Un modèle en émissivité, certes, mais calibré pour nos applications atmosphériques	57
3.4	Une expression analytique des coefficients d'absorption gris pour la résolution de l'ETR	61
3.5	Quelques remarques sur ce modèle gris	62

3.1 Quelques principes physiques qui régissent les phénomènes d'absorption, d'émission et de diffusion

Lorsqu'un photon (ou une onde électromagnétique) rencontre une molécule gazeuse, celle-ci peut soit l'absorber, augmentant ainsi son niveau d'énergie, soit la diffuser, changeant ainsi la trajectoire du photon. À l'inverse, la molécule de gaz peut diminuer son niveau d'énergie en émettant un photon (Modest, 2003). Sans l'avoir expliqué, nous avons jugé nécessaire de préciser que la diffusion par les molécules dans le domaine de l'infrarouge pouvait être négligée dans l'étude des transferts radiatifs. Il s'agit là d'une approximation qui sera faite tout au long de notre étude. Ceci est vrai tant que la taille des particules reste petite devant les longueurs d'ondes [$3\mu m$, $50\mu m$] considérées. Pendant les heures de formation du brouillard, il n'y a pas encore formation de gouttelettes d'eau susceptibles d'activer les processus de diffusion. Notre champ d'étude se limite donc aux deux phénomènes que sont l'absorption et l'émission, dont nous allons expliquer brièvement les origines.

3.1.1 Un seul quantum de mécanique quantique pour expliquer...

On distingue trois façons de capturer ou de céder un photon appelées *absorption induite*, *émission spontanée*, *émission induite*. Aussi, ces transitions énergétiques ne peuvent s'effectuer que pour des longueurs d'ondes (ou fréquences) données – c'est la raison pour laquelle on parle de raies d'absorption – qui illustrent le caractère discret de ces transitions énergétiques. En réalité, le spectre d'absorption ne correspond pas à une somme de pics de Dirac. Les raies d'absorption sont en effet élargies c'est-à-dire que les transitions apparaissent dans un petit intervalle de fréquences et non à une fréquence donnée. On définit ainsi le « line-integrated absorption coefficient » couramment appelé l'intensité de la raie S_ν (relation écrite en fréquence) :

$$S_\nu = \int_{\Delta\nu} k_\nu \quad (3.4)$$

Défini de la sorte, on parle de coefficient d'absorption effectif, comprenant à la fois les transitions énergétiques dues à l'absorption et l'émission induite. On rencontre également dans la littérature du rayonnement le « mass absorption coefficient »,

$$k_{\rho\nu} \equiv \frac{k_\nu}{\rho} \quad (3.5)$$

et le « pressure absorption coefficient »

$$k_{p\nu} \equiv \frac{k_\nu}{p} \quad (3.6)$$

Les raies spectrales ne sont donc jamais monochromatiques, mais élargies avec un maximum d'absorption aux longueurs d'ondes prédites par la mécanique quantique.

Cet élargissement est dû en majeure partie à trois phénomènes : l'élargissement naturel, collisionnel et l'effet Doppler. La conséquence est donc un spectre d'absorption avec des variations extrêmement importantes (même si le recouvrement des raies dans une bande adoucit les variations). Cette forte variabilité, associée au fait que le spectre comporte des dizaines de milliers de raies, confère à l'ETR et aux calculs de transferts radiatifs leur spécificité de traitement numérique. Pour les modèles de propriétés radiatives de gaz – on sous-entend par là le problème d'intégration sur la longueur d'onde – on distingue 4 grandes familles de modèles que nous allons présenter ci-après.

3.2 Les quatre familles de modèles de propriétés radiatives

3.2.1 Calculs Raie Par Raie - Line-By-Line Calculations (LBL)

Comme son nom l'indique, ce modèle consiste à résoudre l'ETR pour des centaines de milliers de longueurs d'onde. Cette méthode nécessite des données très détaillées sur les coefficients d'absorption que l'on trouve dans la base de données HITRAN (Rothman et al., 2009) limitées aux conditions atmosphériques et HITEMP (Rothman et al., 2010), la version hautes températures. L'utilisation de ce modèle nécessite des ressources informatiques telles qu'il n'est utilisé en général que pour valider des modèles plus approximatifs.

3.2.2 Modèle à bandes étroites - Narrow Band Models

Pour une bande de longueur d'onde donnée $\Delta\lambda$, le coefficient d'absorption moyen \bar{k}_λ ne sera rien d'autre que

$$\bar{k}_\lambda = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda-\Delta\lambda/2}^{\lambda+\Delta\lambda/2} k_\lambda d\lambda. \quad (3.7)$$

Le calcul de ces coefficients moyens sur les bandes étroites requiert des informations sur l'espacement des raies isolées et leur intensité. Certains modèles se basent sur des considérations a priori, portant sur la répartition de ces raies dans une bande :

- Le modèle Elsasser (1942) suppose qu'au sein d'une bande, l'espace entre les raies isolées et l'intensité de ces dernières sont constants.
- Les modèles statistiques considèrent que la répartition des raies dans une bande est aléatoire, tout comme leur intensité. On appellera $p(S)$ la densité de probabilité de l'intensité des raies.

$$\text{Goody (1952) Model : } p(S) = \frac{1}{\bar{S}} \exp\left(-\frac{S}{\bar{S}}\right) \mathbf{1}_{[0,+\infty[} \quad (3.8)$$

$$\text{Malkmus (1967) Model : } p(S) = \frac{1}{\bar{S}} \exp\left(-\frac{S}{\bar{S}}\right) \mathbf{1}_{[0,+\infty[} \quad (3.9)$$

Le modèle de Malkmus consiste à remplacer $\frac{1}{\bar{S}}$ par $\frac{1}{S}$ dans la densité de probabilité de l'intensité des raies. L'utilisation du modèle Malkmus avec une résolution

de 25cm^{-1} génère une erreur maximale de 10% avec le LBL (Soufiani and Taine, 1997).

3.2.3 Modèle à bandes larges - Wide Band Models

- Modèle « Boîte » Penner (1959) : ce modèle consiste simplement calculer un coefficient d'absorption moyen sur une largeur de bande, appelée largeur de bande effective. Ce modèle reste extrêmement sensible à la largeur de bande effective, dont le choix s'apparente à un art obscur. Néanmoins, en raison de sa simplicité, il est très utilisé.
- Exponential Wide Band Model Edwards (1965) : C'est le modèle à bandes larges « qui fonctionne le mieux », ce qui signifie que le modèle est capable de reproduire les mesures expérimentales avec une erreur relative d'environ 20% (atteignant parfois 50% à 80%).

3.2.4 Modèle à bandes étroites et larges - k-distributions et Correlated K-Distributions

Une autre approche consiste à transformer l'intégrale - au sens de Riemann - sur la longueur d'onde par une intégrale - au sens de Lebesgue - sur la distribution cumulée du coefficient d'absorption (Arking and Grossman, 1972) (Lacis and Oinas, 1991). Cette méthode suivant la largeur de bande se range parmi les modèles à bandes étroites ou larges. L'hypothèse faite est que, sur chaque bande, la fonction de Planck est invariante. Pour une colonne de gaz d'épaisseur optique L , sa transmittivité moyenne sur une bande spectrale s'écrit :

$$\bar{\tau}_\lambda(L) = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\Delta\lambda} e^{-k_\lambda L} d\lambda = \int_0^{+\infty} e^{-kL} f(k) dk \quad (3.10)$$

Cette intégrale peut se réécrire au sens de Lebesgue :

$$\int_{\Delta\lambda} e^{-k_\lambda L} d\lambda = \int_{k_{\lambda,\min}}^{k_{\lambda,\max}} e^{-k_\lambda L} \left| \frac{d\lambda}{dk_\lambda} \right| dk_\lambda \quad (3.11)$$

$f(k)$ ainsi défini n'est rien d'autre que la somme pondérée du nombre de points où $k_\lambda = k$:

$$f(k) = \frac{1}{\Delta\lambda} \sum_i \left| \frac{d\lambda}{dk_\lambda} \right|_i = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\Delta\lambda} \delta(k - k_\lambda) d\lambda \quad (3.12)$$

Ces k-distributions, en plus d'avoir un comportement irrégulier - $f(k) \rightarrow \infty$ pour chaque borne k_{\min} et k_{\max} - sont consommatrices de temps CPU ; mais pas leur intégrale... Aussi, en définissant $g(k)$, la fonction de répartition de $f(k)$,

$$g(k) = \int_0^k f(k) dk \quad (3.13)$$

on peut réécrire la transmittivité - sur la bande spectrale considérée - comme suit :

$$\bar{\mathcal{T}}_{\lambda}(L) = \int_0^1 e^{-k(g)L} dg \quad (3.14)$$

avec $k(g)$ - l'inverse de la fonction de répartition $g(k)$ - étant une fonction particulièrement régulière de g qui joue le rôle d'une longueur d'onde artificielle moyennée par la largeur de bande évoluant entre 0 et 1.

Une remarque, non sans importance, concernant la définition des k-distributions peut être faite - et pas seulement pour embellir le caractère mathématique de ce modèle. L'équation 3.10 montre que $f(k)$ n'est rien d'autre que la transformée de Laplace inverse de la transmittivité :

$$f(k) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{\mathcal{T}}_{\lambda}(L)\} \quad (3.15)$$

Domoto (1974) qui a reconnu cette propriété le premier a également trouvé l'expression analytique de la k-distribution basée sur le modèle de Malkmus, ainsi que sa fonction de répartition :

$$f(k) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\bar{k}\beta}{\pi k^3}} \exp \left[\frac{\beta}{4} \left(2 - \frac{\bar{k}}{k} - \frac{k}{\bar{k}} \right) \right] \quad (3.16)$$

$$g(k) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{\sqrt{\beta}}{2} \left(\sqrt{\frac{\bar{k}}{k}} - \sqrt{\frac{k}{\bar{k}}} \right) \right] + \frac{1}{2} e^{\beta} \operatorname{erfc} \left[\frac{\sqrt{\beta}}{2} \left(\sqrt{\frac{\bar{k}}{k}} + \sqrt{\frac{k}{\bar{k}}} \right) \right] \quad (3.17)$$

Les propriétés de cette k-distribution sont décrites par Dufresne et al. (1999) et sont utilisées pour calculer analytiquement les taux de refroidissement pour des atmosphères stratifiées.

3.2.5 Modèles globaux - Full spectrum

Si les modèles présentés ci-avant nécessitent plusieurs intégrations sur le spectre afin d'obtenir les grandeurs physiques permettant de coupler le rayonnement thermique à la mécanique des fluides, d'autres modèles ne résolvent qu'une seule ETR préalablement intégrée sur le spectre. Ces modèles globaux sont également appelés full spectrum. C'est le cas du modèle Full spectrum k-distribution (FSK) (Modest and Zhang, 2002) et du modèle Spectral-Line-Based Weighted-Sum-of-Gray-Gases (SLW) développé par Denison and Webb (1993). Ces modèles peuvent être considérés comme des évolutions du modèle Weighted-Sum-of-Gray-Gases (WSSG) de Hottel and Sarofim (1967), très utilisé pour les applications type combustion et écoulements réactifs.

3.2.6 Modèle gaz gris ou en émissivité - Broadband emissivity-flux scheme

Encore moins sophistiqués que les modèles à bandes larges, il existe des modèles intégrant le coefficient d'absorption sur tout le spectre. On parle de modèle en gaz

gris dont font partie les modèles en émissivité. Nous revenons sur ces modèles très utilisés dans les simulations atmosphériques dans la sous-section suivante.

Tous les modèles présentés ci-avant ont été formulés pour un milieu homogène (pression, température constante le long du chemin optique L). Une difficulté majeure, en plus de l'intégration angulaire, réside dans la modélisation des propriétés radiatives pour un mélange de gaz avec température et pression variables – le cas de l'atmosphère –, et dans ce cas précis un recouvrement entre les raies d'absorption des différents gaz et surtout un chemin optique inhomogène. Ce problème est également évoqué ci-après.

3.3 Un modèle en émissivité, certes, mais calibré pour nos applications atmosphériques

Traditionnellement, les codes de calcul de transferts radiatifs, dans le domaine atmosphérique, étaient unidimensionnels. En effet, l'hypothèse d'une atmosphère plane-parallèle - composée de couches horizontales, parallèles d'air, homogènes - est souvent valable. De ce fait, bien que la nature du rayonnement soit tridimensionnelle, certains codes radiatifs sont unidimensionnels. Nous en avons d'ailleurs présenté un dans le chapitre 1. Revenons un peu plus longuement sur la manière de modéliser les propriétés radiatives du milieu. Dans l'introduction de ce chapitre, nous avons distingué deux formulations de l'ETR : une formulation différentielle (3.1) et une formulation intégrale (3.2). Pour les propriétés radiatives, ces deux approches induisent respectivement une formulation en coefficient d'absorption et une formulation en terme de transmittivité. La suite du paragraphe détaille les différentes étapes du modèle en émissivité pour effectuer le lien avec le coefficient d'absorption gris.

Pour un milieu non diffusant, on a vu dans le chapitre 1 que l'ETR peut s'écrire de la manière suivante :

$$\left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}\right) I_{\lambda}(s, \vec{S}) = -k_{\lambda}(s)I_{\lambda}(s, \vec{S}) + k_{\lambda}(s)I_{\lambda}^o(s)$$

L'ETR, pour une atmosphère plane-parallèle s'écrit :

$$\mu \frac{\partial I_{\lambda}}{\partial z}(z, \mu) = -k_{\lambda}(z)I_{\lambda}(z, \mu) + k_{\lambda}(z)I_{\lambda}^o(z)$$

avec μ , le cosinus de l'angle zénithal θ . On définit la luminance montante I^{\uparrow} et descendante I^{\downarrow} par,

$$\begin{aligned} I_{\lambda}^{\uparrow}(z, \mu) &= I_{\lambda}(z, \mu), \mu > 0 \\ I_{\lambda}^{\downarrow}(z, \mu) &= I_{\lambda}(z, -\mu), \mu > 0 \end{aligned}$$

En séparant l'ETR suivant le sens des directions, on peut former le système d'équation

suivant à partir de (1.35) :

$$\mu \frac{\partial I_{\lambda}^{\uparrow}(z, \mu)}{\partial z} = -k_{\lambda}(z) \left[I_{\lambda}^{\uparrow}(z, \mu) + I_{\lambda}^{\circ}(z) \right] \quad (3.18)$$

$$\mu \frac{\partial I_{\lambda}^{\downarrow}(z, \mu)}{\partial z} = k_{\lambda}(z) \left[I_{\lambda}^{\downarrow}(z, \mu) - I_{\lambda}^{\circ}(z) \right]. \quad (3.19)$$

L'expression sur les flux est obtenue après une avoir intégré autour de l'angle solide la forme intégrale du système d'équation précédent (cf chapitre 1).

$$\begin{aligned} F^{\uparrow}(z) &= \int_0^{\infty} \pi I_{\lambda}^{\circ}(0) \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(0, z) d\lambda \\ &\quad - \pi \int_0^{\infty} \int_0^z I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(z', z)}{\partial z'} dz' d\lambda \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$F_{\lambda}^{\downarrow}(z) = \pi \int_0^{\infty} \int_{+\infty}^z I_{\lambda}^{\circ}(z') \frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(z, z')}{\partial z'} dz' d\lambda. \quad (3.21)$$

où $\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}$ est la transmittance monochromatique diffuse,

$$\tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(z', z) = 2 \int_0^1 \mathcal{T}_{\lambda}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \mu d\mu, \quad (3.22)$$

et \mathcal{T}_{λ} , la transmittance monochromatique

$$\mathcal{T}_{\lambda}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) = \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_{z'}^z k_{\lambda}(z'') dz''\right). \quad (3.23)$$

écrites en coordonnées z .

Les grandeurs radiométriques monochromatiques doivent être intégrées sur la longueur d'onde (ou la fréquence) pour calculer le flux net et incident aux parois ou encore le terme source radiatif (taux de réchauffement ou refroidissement). Aujourd'hui la communauté atmosphérique utilise majoritairement les modèles CKD ou tout du moins des modèles à bandes. Cependant, dans les modèles de prévision opérationnels, le coût calcul est un facteur décisif dans le choix des modèles numériques. Une alternative aux modèles à bandes est d'utiliser le modèle en émissivité, – apparaissant dans la littérature sous le nom de « broadband emissivity scheme » –, qui paramétrise l'intégration de l'ETR sur la longueur d'onde (ou la fréquence) en définissant l'émissivité totale de la couche définie entre les abscisses z et z' . L'émissivité suppose l'isothermie de la couche atmosphérique considérée. L'« Isothermal Broadband Emissivity » (Liou, 2002) – que l'on nomme émissivité dans ce manuscrit – le long de $z' \rightarrow z$ est défini par :

$$\epsilon : (z', z) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^{\infty} \left[1 - \tilde{\mathcal{T}}_{\lambda}(z, z') \right] \pi I_{\lambda}^{\circ}(z') d\lambda. \quad (3.24)$$

L'émissivité n'est rien d'autre que le rapport entre le rayonnement émis le long du chemin optique délimité par z et z' et l'émission du corps noir. On obtient donc,

pour les flux montants et descendants une formulation en émissivité :

$$F^\uparrow(z) = \sigma T_{sol}^4 (1 - \epsilon(0, z)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (3.25)$$

$$F^\downarrow(z) = \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (3.26)$$

Le développement de ces modèles est à mettre à l'actif de Elsasser (1942), Möller (1943) et Yamamoto (1952). Ces travaux ont permis de calculer des tables pour les émissivités des gaz atmosphériques et de mener ainsi l'intégration sur la longueur d'onde des flux. En s'appuyant sur les travaux de Yamamoto (1952), Sasamori (1968) a proposé un ensemble de fonctions analytiques d'absorption ajustées sur ces tables. Cela permet donc de s'affranchir de l'intégration sur la longueur d'onde. C'est ainsi que Musson-Genon (1987) a développé le modèle de transfert radiatif 1-D dans le module atmosphérique de *Code_Saturne* que nous utilisons à ce jour, validé sur la campagne de mesure de Cabauw. Notons également que les travaux de McNider, publiés dans le livre de PIELKE (1984) montrent le bon comportement des fonctions d'émissivité sur le jour 33 de Wangara, couramment utilisé dans la validation des modèles atmosphériques, notamment celle de *Code_Saturne*. Le lecteur pourra également se référer à l'article de Savijärvi (1990) qui effectue des intercomparaisons entre les tables d'Elsasser, Yamamoto et son propre modèle implanté dans HIRLAM.

Dans le cas d'un milieu non homogène, le spectre d'absorption dépend de la longueur d'onde, mais également de la pression et de la température. Pour découpler les effets de la longueur d'onde d'un côté et de la pression/température de l'autre, il convient de procéder à une approximation d'échelle, et ce, quels que soient les modèles utilisés pour prendre en compte l'absorption (aussi bien les modèles à bandes larges et étroites que les autres). Pour les méthodes basées sur les k-distributions, cette approximation apparaît dans la littérature sous le nom de « scaled-k » (see Modest, 2003, chap. 10), ou encore de « one-parameter scaling approximation » (see Liou, 2002, chap. 4) et se généralise aux autres modèles. Cette approximation consiste à écrire le coefficient d'absorption comme le produit de deux facteurs : le coefficient d'absorption qui dépend de la longueur d'onde uniquement et le chemin optique corrigé qui dépend de la pression et de la température :

$$k_\lambda = k^*(T_0, P_0) \mathcal{F}(T_0, P_0, T, P)^n \quad (3.27)$$

où \mathcal{F} est fonction d'échelle qui élimine la dépendance du coefficient d'absorption à la température et la pression. Ces corrections, connues sous le nom d'approximation d'échelle à un paramètre sont attribuées à Chou and Arking (1980). $k^*(z, T_0, P_0)$ est le coefficient d'absorption pour une température et pression de référence T_0 et P_0 .

Dans l'écriture en coordonnées optiques, on définit le chemin optique corrigé selon le gaz contenu dans la couche $z' \rightarrow z$ par :

$$u_g(z', z) = \int_{z'}^z \rho_g(z'') \mathcal{F}(T_0, P_0, T, P)^d z'' \quad (3.28)$$

L'émissivité $\epsilon(z', z)$ pour chaque gaz est maintenant fonction du chemin optique corrigé : $\epsilon(u_g(z', z))$. L'émissivité totale pour les trois principaux gaz atmosphériques absorbant dans l'infrarouge est :

$$\begin{aligned}\epsilon(z', z) &= \epsilon_{H_2O}(u_{H_2O}(z', z)) + \epsilon_{O_3}(u_{O_3}(z', z)) \\ &\quad + \epsilon_{CO_2}(u_{CO_2}(z', z))T_{15\mu}(u_{H_2O}(z', z)) \\ &\quad + \epsilon_{\text{dim}}(u_{\text{dim}}(z', z))T_w(u_{H_2O}(z', z)).\end{aligned}\tag{3.29}$$

où $T_{15\mu}$ et T_w sont les transmittivités respectives de la vapeur d'eau dans la bande 15μ et la bande de rotation, et ϵ_{dim} l'émissivité des dimères de la vapeur d'eau (H_2O)₂.

Le problème du recouvrement des spectres est traité en utilisant des fonctions d'émissivité et de transmittivité intégrées sur la longueur d'onde et en supposant que la transmittivité intégrée totale est le produit des transmittivités intégrées de chaque gaz. Cette approximation ne trouve sa justification que dans la simplicité de sa mise en œuvre numérique. Si la relation

$$\tilde{T}_{\lambda,(g_1,g_2)} = \tilde{T}_{\lambda,g_1} \times \tilde{T}_{\lambda,g_2}\tag{3.30}$$

est vraie pour une longueur d'onde donnée, on ne peut pourtant pas écrire sans considérations physiques sur le spectre que

$$\int_{\Delta\lambda} \tilde{T}_{\lambda,(g_1,g_2)} d\lambda = \int_{\Delta\lambda} \tilde{T}_{\lambda,g_1} d\lambda \times \int_{\Delta\lambda} \tilde{T}_{\lambda,g_2} d\lambda\tag{3.31}$$

En effet, cette hypothèse peut conduire à d'importantes erreurs comme en témoigne l'article de Tessé and Lamet (2011).

Cependant, Fu and Liou (1992) ont montré que pour la bande $15\mu m$, l'erreur introduite par l'utilisation de (3.30) pour traiter le recouvrement des spectres de la vapeur d'eau et du dioxyde de carbone sur le flux descendant au sol et au sommet de l'atmosphère est de l'ordre de 1.2%. Par ailleurs, l'erreur maximale obtenue sur les taux de réchauffement est de l'ordre de $0.15K.day^{-1}$ pour une altitude avoisinant $50km$. En dessous de $30km$, l'erreur est d'environ $0.05K.day^{-1}$ et proche de la surface, elle ne dépasse pas $0.08K.day^{-1}$. Pour les applications atmosphériques, l'erreur générée par ce traitement des corrélations spectrales est d'un ordre de grandeur bien plus faible que l'erreur générée par l'utilisation des modèles en émissivité.

L'expression de ϵ_{H_2O} , ϵ_{CO_2} , $T_{15\mu}$ and T_w est disponible en annexe. Reprenons la formulation en émissivité du flux montant et descendant :

$$F^\uparrow \cong \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz'\tag{3.32}$$

$$F^\downarrow \cong \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz'\tag{3.33}$$

Pour une surface grise, σT_g^4 est remplacée par $\epsilon_g \sigma T_g^4 + (1 - \epsilon_g) F^\downarrow(0)$, où ϵ_g est

l'émissivité du sol, ce qui conduit à :

$$F^\uparrow \cong [\epsilon_g \sigma T_g^4 + (1 - \epsilon_g) F^\downarrow(0)] (1 - \epsilon(z, 0)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (3.34)$$

$$F^\downarrow \cong \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (3.35)$$

Toutefois, le terme du flux descendant réfléchi au sol, $(1 - \epsilon_g) F^\downarrow(0)$ est sujet à controverse. Edwards (2009) et Ponnulakshmi et al. (2009) ont mis en évidence le sur-refroidissement radiatif proche de la surface généré par cette formulation. Les considérations physiques sur le spectre des flux montants et descendants montrent que le flux réfléchi ne doit pas être atténué par $(1 - \epsilon(z, 0))$ – car ce qui n'a pas été absorbé le long de $z \rightarrow 0$ reste transparent le long $0 \rightarrow z$ après réflexion au sol – et doit être écrit selon Ponnulakshmi et al. (2012) :

$$F^\uparrow \cong \epsilon_g \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) + (1 - \epsilon_g) \int_0^{z_\infty} \sigma T^4(z') \epsilon(-z, z') - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\epsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (3.36)$$

$(1 - \epsilon_g) \int_0^{z_\infty} \sigma T^4(z') \epsilon(-z, z')$ peut être compris comme étant le flux descendant le long de $-z \rightarrow z_\infty$. Afin de ne pas générer de sur-refroidissement en proche surface, nous ne considérerons que des parois noires dans toutes nos expériences numériques i.e $\epsilon_g = 1$.

En supposant que l'atmosphère est isotherme avec une discontinuité de température entre le sol et l'air, $T_A \neq T_g$, les flux peuvent s'écrire simplement en fonction de l'émissivité :

$$F^\uparrow(z) = \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) + \epsilon(z, 0) \sigma T_A^4 \quad (3.37)$$

$$F^\downarrow(z) = \epsilon(z, z_\infty) \sigma T_A^4 \quad (3.38)$$

Cette solution est quasi-analytique dans le cadre d'une atmosphère plane-parallèle et isotherme (Lenoble, 1993). Afin de retrouver les coefficients d'absorption gris, données d'entrée nécessaires pour la résolution de l'ETR dans le module 3-D de rayonnement, nous allons inverser l'ETR, pour trouver une expression analytique – sous certaines hypothèses – des coefficients d'absorption gris en fonction de la solution quasi-analytique des flux montants et descendants.

3.4 Une expression analytique des coefficients d'absorption gris pour la résolution de l'ETR

Reprenons l'expression de l'ETR grise résolue par *Code_Saturne* .

$$(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I(s, \vec{S}) = -k(s) I(s, \vec{S}) + k(s) I^o(s), \quad (3.39)$$

où s est la position et

$$I(s, \vec{S}) = \int_0^\infty I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda$$

$$k(s) = \int_0^\infty k_\lambda(s) I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda \Big/ \int_0^\infty I_\lambda(s, \vec{S}) d\lambda$$

$$I^o(s) = \int_0^\infty I_\lambda^o(s) d\lambda = \sigma T^4(s) / \pi ,$$

les quantités radiométriques intégrées sur le spectre.

Sous l'hypothèse de l'atmosphère plane-parallèle, les équations régissant l'évolution de la luminance montante et descendante sont – voir par exemple (Lenoble, 1993) :

$$\mu \frac{\partial I^\uparrow}{\partial \tau}(\tau, \mu) = -I^\uparrow(\tau, \mu) + I^o(\tau) \quad (3.40)$$

$$\mu \frac{\partial I^\downarrow}{\partial \tau}(\tau, \mu) = I^\downarrow(\tau, \mu) - I^o(\tau) , \quad (3.41)$$

avec $\tau = \int_0^z k(z') dz'$, le chemin optique entre 0 et z .

Les équations sur les flux s'obtiennent alors par l'intégration sur l'angle zénithal des équations (3.40) et (3.41). En réalité, il s'agit plutôt de l'intégration sur l'angle solide. Mais dans le cadre de l'approximation plane-parallèle, celle-ci se réduit à une intégration sur θ . Une approximation très largement utilisée dans les codes atmosphériques consiste à éliminer la dépendance à l'angle zénithal en faveur d'une inclinaison constante $\tilde{\mu}$ telle que $\tilde{\mu}^{-1} = 5/3$. Cette approximation, plus connue sous le nom de facteur de diffusivité a été employée pour la première fois par Elsasser (1942) pour remplacer la transmittivité – qui dépend de θ – par la transmittivité diffuse. Cela revient à prendre un angle zénithal égal à 0, mais un chemin optique multiplié par le facteur 5/3 (voir chapitre 1).

En considérant une isotropie hémisphérique de notre atmosphère, (3.40) et (3.41) écrites en coordonnées z , deviennent :

$$\frac{\partial F^\uparrow}{\partial z}(z) = -\frac{5}{3}k(z) [F^\uparrow(z) - \sigma T^4(z)] \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial F^\downarrow}{\partial z}(z) = \frac{5}{3}k(z) [F^\downarrow(z) - \sigma T^4(z)] , \quad (3.43)$$

En remplaçant F^\uparrow et F^\downarrow par l'expression analytique des flux pour une atmosphère isotherme, (3.37) et (3.38), ce qui précède conduit à :

$$k^\uparrow(z) = \frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\uparrow}{\partial z}(0, z) \frac{1}{[1 - \epsilon^\uparrow(0, z)]} \quad (3.44)$$

$$k^\downarrow(z) = -\frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\downarrow}{\partial z}(z, z_\infty) \frac{1}{[1 - \epsilon^\downarrow(z, z_\infty)]} . \quad (3.45)$$

3.5 Quelques remarques sur ce modèle gris

Les coefficients d'absorption dépendent des émissivités montantes et descendantes, donc ils sont fonction de la pression et de la température, mais surtout du chemin optique entre 0 et z et z et z_∞ . La différence avec le coefficient d'absorption

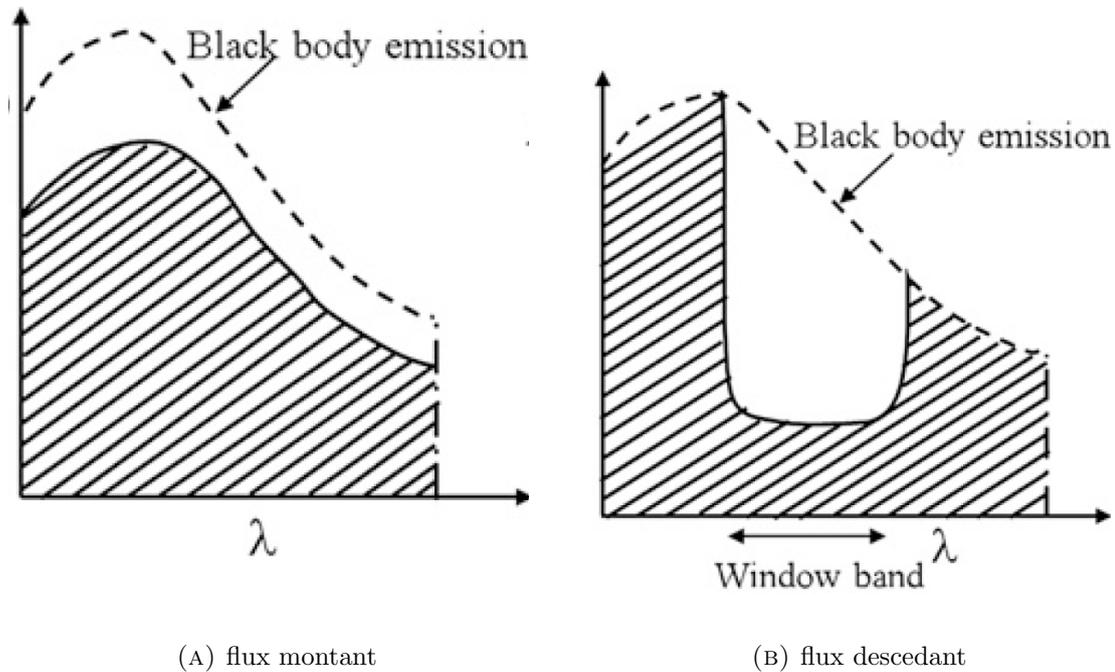


FIGURE 3.1 – Spectre des flux montant et descendant ; enveloppe de l'émission du corps noir ; (Ponnulakshmi et al., 2012)

monochromatique est le caractère non local de leur expression. Voici 4 remarques permettant de mieux comprendre cette formulation et sa validité :

1. L'approximation à deux flux conduit à deux équations différentes sur les flux et la luminance. La résolution de l'ETR en utilisant ce modèle de propriétés radiatives équivaut en un sens à appliquer un principe de superposition. Le terme source radiatif, égal à la divergence du flux net, peut être vu comme étant la contribution de la divergence des flux montant et descendant. Cette hypothèse reste valide même si les flux sont couplés (paroi grise).
2. La dépendance de k^\uparrow et k^\downarrow aux chemins optiques est intrinsèque à la définition du coefficient d'absorption équivalent dans l'ETR grise. Ces coefficients d'absorption sont définis mathématiquement comme étant ceux vérifiant les deux équations (3.44) et (3.45). Les solutions analytiques des flux, données pour une atmosphère plane-parallèle isotherme, contiennent des informations qui ont été intégrées le long des chemins optiques $0 \rightarrow z$ et $z \rightarrow z_\infty$. k^\uparrow et k^\downarrow ne peuvent être qualifiés de coefficients d'absorption qui est une donnée locale. À travers la dépendance des coefficients k^\uparrow et k^\downarrow aux fonctions d'émissivité – qui dépendent du chemin optique intégré entre 0 et z ou z_∞ et z^- , cette irréversibilité leur confèrent leur nature non locale.
3. L'expression de k^\uparrow et k^\downarrow dérive de considérations mathématiques. Traiter les flux séparément, selon l'orientation de la direction, mais également des coefficients d'absorption n'est pas une idée nouvelle comme en témoigne l'article de Edwards (1996). Généralement, $k^\uparrow \neq k^\downarrow$, mais comme dans certains codes radiatifs – notamment dans les GCM – l'extinction (ou absorption si on néglige la diffusion) équivalente est basée sur les flux nets. Nous aurions pu travailler sur le flux net – dont nous aurions obtenu la solution analytique $F^\uparrow - F^\downarrow$

en soustrayant (3.42) et (3.43) – et supposer que $k^\uparrow = k^\downarrow$. Cela nous aurait conduits à l'expression suivante :

$$k(z) = \frac{3}{5} \frac{-\frac{\partial F_{\text{net}}}{\partial z}}{F^\uparrow(z) + F^\downarrow(z) - 2\sigma T^4(z)} \quad (3.46)$$

Cette formulation peut néanmoins faire apparaître des problèmes numériques et, notamment, une absorption négative. Séparer les coefficients d'absorption selon les directions montantes et descendantes nous assure leur positivité. En effet, les fonctions $z \mapsto \epsilon : (0, z)$ et $z \mapsto \epsilon : (z_\infty, z)$ sont des fonctions respectivement croissantes et décroissantes. Leurs dérivées respectives sont donc positives et négatives.

4. Les profils spectraux des flux descendants et montants sont très différents (Ponnulakshmi et al., 2012) comme le montrent les figures 3.1a et 3.1b. Cet argument physique se vulgarise en considérant simplement le fait que les flux montants et descendants sont de couleurs différentes, ce qui justifie la partition du spectre selon l'orientation des directions. Cette méthode peut s'apparenter à un modèle à deux-bandes spécial mais sans intégration sur le spectre – nécessaire dans les modèles type CKD. Mathématiquement, cela revient à considérer un unique coefficient d'absorption défini par :

$$k^\uparrow(z) = \begin{cases} k^\uparrow & \text{si } \mu = \cos \theta > 0 \\ k^\downarrow & \text{si } \mu = \cos \theta < 0 \end{cases}$$

Chapitre 4

Vérification et Validation du modèle de propriétés radiatives

Introduction

FAUVE est un projet porté par des personnes qui partagent la même vision des choses et des gens. FAUVE est un collectif ouvert, que l'on a baptisé Corp. On fait FAUVE pour rendre nos vies respectives meilleures, sensées, plus riches, plus dignes, plus belles. FAUVE est à la fois notre béquille et notre lanterne. FAUVE est une quête et la narration de cette quête. FAUVE est la transcription directe de nos joies et de nos peines, de l'espoir, que l'on a de réussir un jour à haïr notre haine, à défaire notre défaitisme, à avoir honte de notre honte, à accepter nos erreurs, [...], et à trouver l'amour

–FAUVE

*Afin de valider notre nouveau modèle d'absorption gazeuse pour l'infrarouge, il nous a semblé important de tester notre modélisation sur une variété de cas. Dans ce chapitre, nous comparons les taux de réchauffement ainsi que le flux descendant au sol obtenus avec le code radiatif 1-D – code de référence validé, utilisant l'approximation à deux flux et un modèle en émissivité – et le code radiatif 3-D – solveur couplé entre la méthode des ordonnées discrètes et le nouveau modèle d'absorption infrarouge développé – de **Code_Saturne**. Pour ce faire, nous nous sommes placés dans le cadre de l'approximation « Cooling-to-Space ». Elle suppose une atmosphère isotherme, avec absence de gradient de température entre le sol et l'atmosphère. Cette*

hypothèse extrêmement forte simplifie considérablement les équations et permet de disposer de solutions analytiques. Ce cas permet la vérification et la validation du code, mais également du modèle d'absorption gazeuse dans l'infrarouge.

C'est en effet l'hypothèse d'isothermie qui nous a permis d'inverser l'ETR et de relier les coefficients d'absorption aux émissivités. Ce cas a donc été décliné afin de tester la condition à la limite radiative supérieure, les méthodes de quadratures angulaires, ainsi que la méthode de calcul du terme source radiatif.

Enfin, nous comparerons notre modèle 3-D sur quelques résultats de simulations du code 1-D forcés par les observations de la campagne de mesure ParisFog. Cette comparaison a pour but d'évaluer l'impact de l'hypothèse d'isothermie dans la formulation des coefficients d'absorption.

Sommaire

4.1	Cadre des expériences numériques	67
4.2	L'approximation Cooling-to-Space - Cas du Cooling-to-Space	67
4.2.1	Quelques considérations sur le maillage et la discrétisation verticale	68
4.2.2	Choix de la méthode de calcul du terme source radiatif	69
4.2.3	Condition à la limite supérieure radiative	70
4.2.4	Sensibilité à la méthode de quadrature	72
4.3	Cas où la T_{sol} est différente de la T_{air} ; vérification des fonctions d'émissivité pour les 3 principaux gaz à effet de serre	77
4.4	Comparaison avec un modèle correlated-k distribution	80
4.5	Simulations avec des profils atmosphériques réalistes	81
4.5.1	Condition ciel clair	83
4.5.2	Conditions ciel nuageux	85

4.1 Cadre des expériences numériques

Le but de cette étude comparative était à la fois de prendre en main les codes radiatifs 1-D et 3-D de *Code_Saturne*, et de s'assurer de la cohérence entre les résultats des deux modèles sur un cas académique afin de vérifier la formulation des propriétés radiatives pour l'ETR grise résolue par la méthode des ordonnées discrètes. Les sorties du code radiatif 1-D, utilisées comme solutions de référence pour notre inter-comparaison ont été validées sur les campagnes de mesures de Cabaw (Musson-Genon, 1987) et ParisFog (Zhang et al., 2014). Sur ces données expérimentales, le code 1-D a montré sa capacité à simuler un cycle de vie complet de brouillard radiatif. Dans le but de vérifier et de valider l'implémentation de cette nouvelle paramétrisation de l'absorption infrarouge, nous avons sélectionné les profils atmosphériques parmi la campagne de mesure ParisFog (Haefelin et al., 2010) sur laquelle nous reviendrons en détail dans le dernier chapitre. Nous avons donc sélectionné parmi ces données, les profils de concentration de vapeur d'eau, de température et de contenu en eau liquide. Grâce à ces données d'entrée, nous avons comparé le modèle radiatif atmosphérique 1-D (existant) au modèle radiatif 3-D utilisant le nouveau modèle d'absorption infrarouge.

Pour toutes nos simulations, nous avons utilisé un domaine rectangulaire de dimension $1\text{km} \times 1\text{km} \times 11\text{km}$. Nous avons également imposé des conditions périodiques sur les parois latérales du domaine. Pour la résolution verticale du maillage, on compte 78 cellules jusqu'à 11km avec un premier niveau à 2m. La base des cellules de nos maillages est un carré de dimension $0.1\text{km} \times 0.1\text{km}$.

4.2 L'approximation Cooling-to-Space - Cas du Cooling-to-Space

Si l'on se réfère à la littérature, l'approximation Cooling-to-Space désigne la méthode de calcul de la divergence du flux radiatif qui consiste à supposer que l'atmosphère est isotherme. Rodgers and Walshaw (1966) ont montré qu'en condition ciel clair, cette méthode fournit une bonne approximation du taux de refroidissement dans l'atmosphère. Dans ce manuscrit, nous avons pris la liberté de surcharger cette définition en désignant également le cas pour lequel on considère une atmosphère isotherme où la température de l'air est égale à celle du sol.

Dans le chapitre précédent, nous avons obtenu des solutions analytiques pour les flux montant et descendant dans le cas d'une atmosphère isotherme :

$$F^\uparrow(z) = \sigma T_g^4 (1 - \epsilon(z, 0)) + \epsilon(z, 0) \sigma T_A^4 \quad (4.1)$$

$$F^\downarrow(z) = \epsilon(z, z_\infty) \sigma T_A^4 \quad (4.2)$$

Dans le cadre du Cooling-to-Space, les expressions des flux s'écrivent de la façon

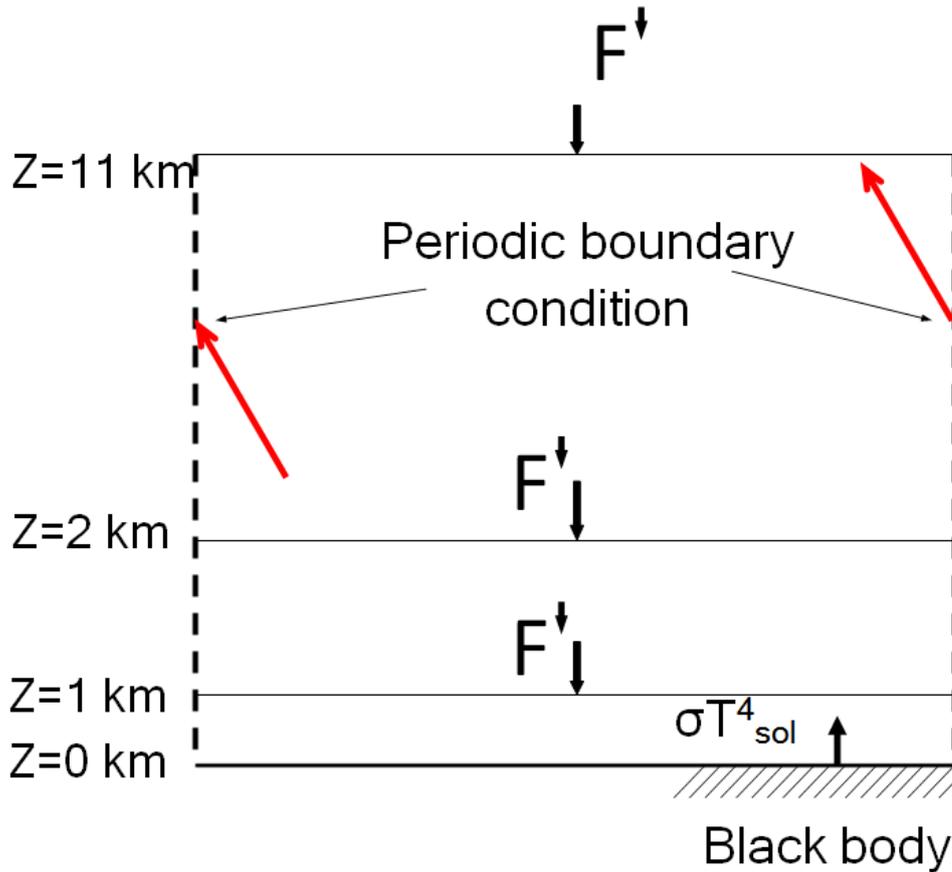


FIGURE 4.1 – 3 domaines de simulation de hauteur 1km , 2km , 11km ; conditions aux limites périodiques dans les directions x et y ; $\epsilon_g = 1$

suivante :

$$F^{\uparrow}(z) = \sigma T_A^4 \quad (4.3)$$

$$F^{\downarrow}(z) = \epsilon(z, z_{\infty}) \sigma T_A^4 \quad (4.4)$$

Ainsi, l'atmosphère est transparente pour le flux montant. Les simulations sur ce cas vont donc mesurer l'écart entre les modélisations 1-D et 3-D du flux descendant et sa contribution à la divergence du flux. Suggéré par Ellingson and Fouquart (1991) et recommandé par Varghese et al. (2003) il est important de tester les sorties des modèles radiatifs pour une atmosphère isotherme. Dans un cas aussi trivial, cela permet une vérification de code.

4.2.1 Quelques considérations sur le maillage et la discrétisation verticale

Préalablement, un test à été fait sur les conditions aux limites latérales. Lorsque nous imposons des conditions aux limites périodiques en translation dans les directions x et y sur les parois latérales dans *Code_Saturne*, le préprocesseur du code effectue un recollement des faces de bords sur lesquelles sont imposées les conditions aux limites. Pour une discrétisation donnée de la verticale et un pas de discrétisation

fixe Δx et Δy , imposer des conditions périodiques dans les directions x et y pour une taille de domaine $N\Delta x \times N\Delta y$ donne des résultats identiquement égaux aux résultats obtenus pour un domaine de taille $\Delta x \times \Delta y$. Dans le cadre de nos comparaisons stationnaires, nous avons donc effectué nos comparaisons sur un maillage composé d'une seule colonne de cellule de taille $0.1\text{km} \times 0.1\text{km} \times 11\text{km}$.

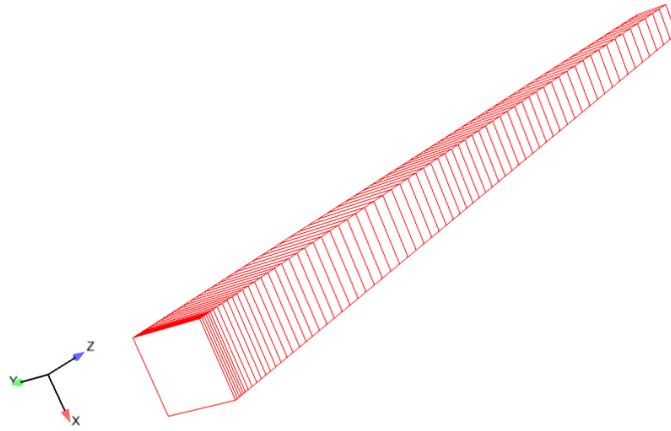


FIGURE 4.2 – Maillage utilisé dans nos simulations, hauteur : 2km , $z_{\min} = 2\text{m}$

Par ailleurs la résolution verticale du maillage, représenté figure 4.2, est un peu particulière. En vue de simuler quelques heures de formation d'un brouillard radiatif, il est impératif d'avoir une résolution très fine près du sol. Tardif (2007) a montré que l'utilisation d'une grille trop grossière – utilisée dans les modèles de prévisions meso-échelle – peut altérer la modélisation des processus thermodynamiques clés impliqués dans la formation du brouillard. De plus ce dernier n'évolue que très rarement au-dessus 500m. C'est pourquoi le maillage suit une évolution logarithmique, puis linéaire et enfin constante sur les derniers niveaux pour atteindre une altitude de 11km.

4.2.2 Choix de la méthode de calcul du terme source radiatif

Si nous avons déjà testé la méthode conservative et semi-analytique sur les cas test de combustion, nous avons souhaité effectuer une comparaison sur un cas atmosphérique. Le premier cas considère une température du sol et de l'atmosphère égale à 270K. Le profil vertical de vapeur d'eau, imposé dans tout le domaine est tracé sur la figure 4.3.

En tant que terme source de l'équation sur la température, le taux de réchauffement S_{rad}

$$S_{\text{rad}} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}} \quad (4.5)$$

doit être calculé. Une approche naturelle consiste à calculer d'abord $\vec{Q}_{\text{rad}} = \int_{4\pi} I(\vec{S}) \vec{S} d\Omega$,

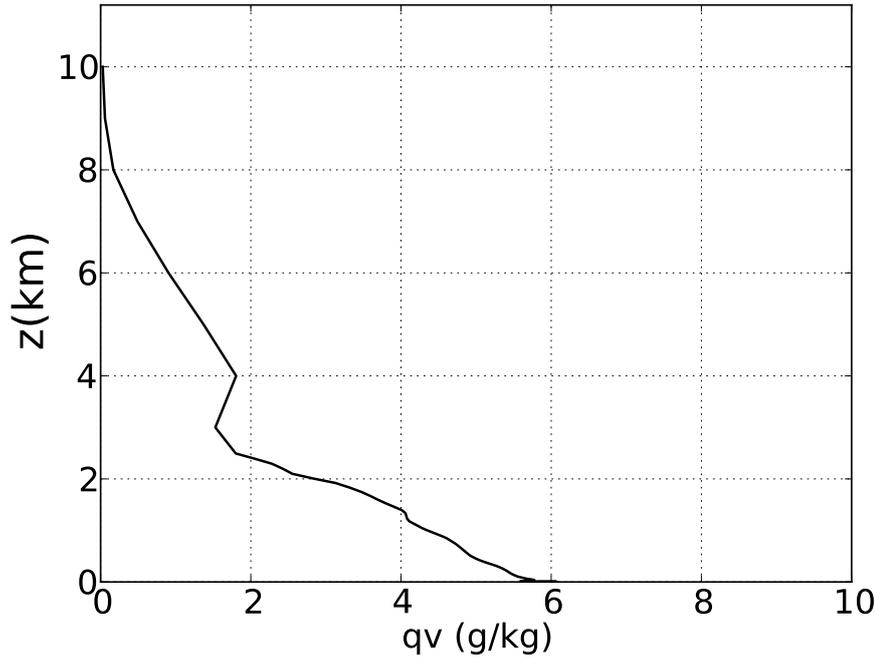


FIGURE 4.3 – Contenu de vapeur d'eau provenant des mesures de la POI13 à 12h le 18/02/2006

puis sa divergence. Cependant, une autre formulation du terme source radiatif peut être trouvée en intégrant l'ETR (3.39) sur l'angle solide.

$$\int_{4\pi} (\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I(s, \vec{S}) d\Omega = \int_{4\pi} [-k(s)I(s, \vec{S}) + k(s)I^o(s)] d\Omega \quad (4.6)$$

En permutant l'opérateur de divergence et l'intégrale, on obtient la forme dite semi-analytique du terme source radiatif :

$$S_{\text{rad}}(s) = \int_{4\pi} k(s)I(s, \vec{S}) d\Omega - 4k(s)\sigma T^4(s) \quad (4.7)$$

$-\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}}$ est la forme conservative de S_{rad} . L'intégration de (4.5) sur un volume de contrôle dV nous donne :

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = - \int_{\Gamma} Q_{\text{net}} d\Gamma \quad (4.8)$$

où Γ est l'adhérence de V – au sens topologique du terme – et $Q_{\text{net}} = \vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n}$ avec \vec{n} un vecteur normal de Γ . L'équation (4.5) respecte donc la conservation de l'énergie (4.8).

Comme pour les enceintes de combustion, les formulations conservative (4.5) et semi-analytique (4.7) donnent des résultats différents. Les problèmes d'oscillations ainsi que l'écart à la solution de référence – les raisons sont données dans le chapitre 2 – de la forme conservative nous ont donc conduit à opter pour la forme semi-analytique.

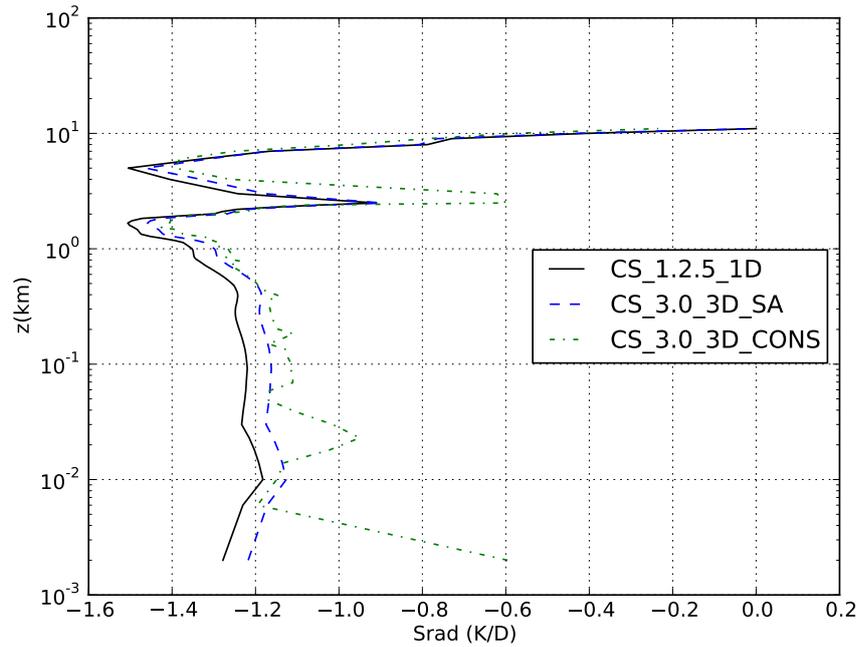


FIGURE 4.4 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine : $11km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source semi-analytique et conservatif

4.2.3 Condition à la limite supérieure radiative

Comme toute équation de transport, les conditions aux limites pour l'équation des transferts radiatifs est un aspect important. Considérer une atmosphère plane-parallèle infinie conduit à la mise en place de conditions aux limites périodiques pour les parois latérales. Pour la condition à la limite supérieure, on considère le vide moléculaire à partir d'une altitude de $100km$. Pour caractériser ce phénomène, on impose une luminance nulle à cette altitude. En vue de simuler le développement d'une couche limite nocturne, et la formation d'un brouillard radiatif, il nous a semblé nécessaire de réduire la hauteur du domaine à $1km$ ou $2km$. À cette altitude, la luminance est bien évidemment non nulle. Une approximation souvent faite dans le domaine infrarouge est de considérer une luminance descendante isotropique en haut du domaine (Garratt and Brost, 1981; Siqueira and Katul, 2010).

Ceci étant, nous pouvons donc écrire que :

$$I^\downarrow(z_{\text{TOP}}) = \frac{F^\downarrow(z_{\text{TOP}})}{\pi} \quad (4.9)$$

où $F^\downarrow(z_{\text{TOP}})$ (voir figure 4.1) est le flux descendant en haut du domaine. Celui-ci peut être calculé une fois au début de la simulation ou bien à chaque début d'itération radiative (si la composition gazeuse de l'atmosphère comprise entre z_{TOP} et z_∞ varie significativement entre deux itérations) .

Pour vérifier la validité de cette approximation, nous avons donc testé cette condition à la limite supérieure. Les résultats de la figure 4.4 montrent le bon comportement de la solution « 3-D » – méthode des ordonnées discrètes + nouveau modèle d’absorption gazeuse – avec la solution « 1-D » – méthode à 2 flux + modèle en émissivité – pour les trois hauteurs de maillages. Par ailleurs, prendre une température du sol égale à la température de l’air dans l’équation (4.1) conduit à une atmosphère transparente pour les flux montants (4.3), autrement dit $F^\uparrow(z) = \sigma T_A^4$. Les valeurs obtenues par les deux codes radiatifs de **Code_Saturne** sont consistants avec l’expression analytique du flux montant pour une atmosphère isotherme sans discontinuité de température entre l’air et le sol.

Les écarts relatifs sur le flux incident au sol et sur le taux de réchauffement entre les deux modèles sont calculés avec la formule suivante :

$$\Delta S_{\text{rad}} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{\text{cel}}} |S_{\text{rad},k}^{\text{3D}} - S_{\text{rad},k}^{\text{1D}}|}{\sum_{k=1}^{N_{\text{cel}}} |S_{\text{rad},k}^{\text{1D}}|} \quad (4.10)$$

$$\Delta Q_{\text{inc}} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{\text{fac}}} |F_{3D,k}^\downarrow(0) - F_{1D,k}^\downarrow(0)|}{\sum_{k=1}^{N_{\text{fac}}} |F_{1D,k}^\downarrow(0)|} \quad (4.11)$$

La vérification de la formulation de la condition à la limite supérieure radiative, ainsi que son bon comportement nous offre la possibilité de limiter la hauteur de notre domaine à 1 ou 2km. Si cela ne représente que quelques dizaines de cellules sur le maillage colonne, l’économie sera de l’ordre de N^2 cellules pour un maillage comportant N cellules dans les directions x et y .

4.2.4 Sensibilité à la méthode de quadrature

Si la sensibilité aux quadratures à été testée pour des enceintes de combustion, il nous a semblé intéressant de la tester sur une atmosphère plane-parallèle isotherme. Nous avons donc repris le cas testé ci-dessus en prenant cette fois-ci le soin de fixer la méthode de calcul du terme source – la méthode semi-analytique – et nous avons fait varier la quadrature parmi celles nouvellement disponibles dans **Code_Saturne**. Ainsi pour les 3 hauteurs de domaine 11km, 2km et 1km, nous avons tracé le profil du taux de réchauffement – toujours négatif dans le cas de l’approximation Cooling-to-Space – sur les figures 4.6 4.7 et 4.8.

Avant d’analyser en détail ces résultats, il est important de revenir sur la discrétisation verticale du maillage. Plus l’altitude augmente, plus la discrétisation est grossière. Dans le cas du domaine de calcul dont la hauteur est 11km, $\Delta z_{\text{max}} =$

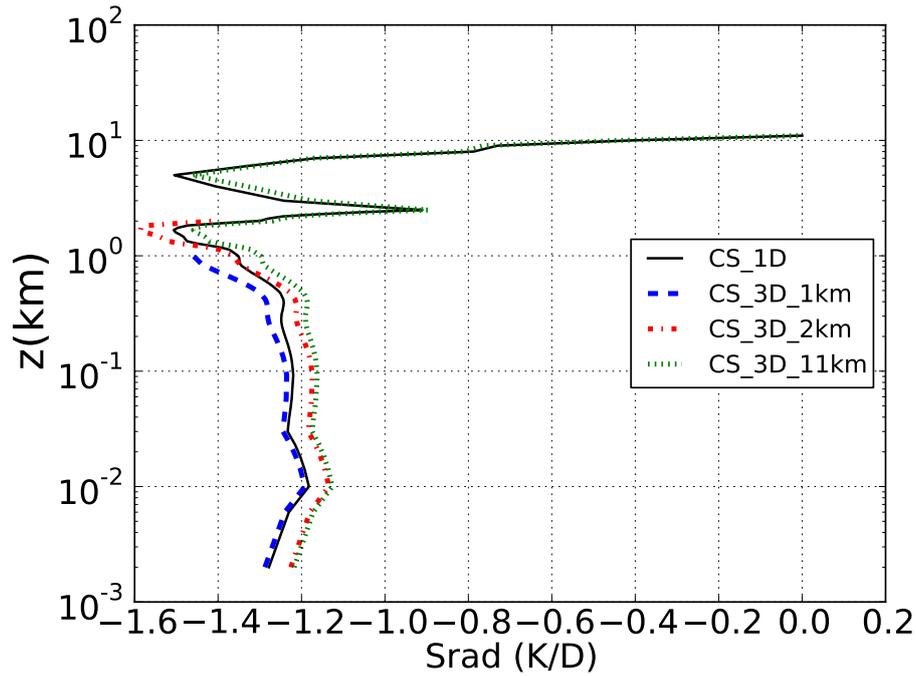


FIGURE 4.5 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$; vapeur d'eau seulement ; 3 hauteurs de domaine : $11km$, $2km$, $1km$; Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source semi-analytique

Quadrature	T2			T4		
	11km	2km	1km	11km	2km	1km
$\Delta S_{\text{rad}}(\%)$	1.95	13.4	20.4	4.43	4.40	9.97
$\Delta Q_{\text{inc}}(\%)$	1.76	2.65	1.73	5.23	1.37	1.18

TABLE 4.1 – Écart relatif entre la solution de référence **Code_Saturne** 1-D et les valeurs calculées par **Code_Saturne** 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures T_2 et T_4

Quadrature	S4			S6			S8		
	11km	2km	1km	11km	2km	1km	11km	2km	1km
$\Delta S_{\text{rad}}(\%)$	2.61	9.84	14.6	6.26	4.69	10.3	5.16	4.61	9.12
$\Delta Q_{\text{inc}}(\%)$	0.34	2.70	1.60	5.47	1.51	1.24	5.81	1.24	1.13

TABLE 4.2 – Écart relatif entre la solution de référence **Code_Saturne** 1-D et les valeurs calculées par **Code_Saturne** 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures S_4 , S_6 et S_8

1000m. Pour une hauteur de $2km$, $\Delta z_{\text{max}} = 100m$ et enfin pour $1km$, $\Delta z_{\text{max}} = 44m$. C'est pourquoi il faudra considérer que la réduction de la hauteur du domaine est équivalent à un raffinement de maillage et analyser les résultats à la lumière de cette remarque. Si les tracés du taux de réchauffement sur figures 4.6, 4.7 et 4.8 per-

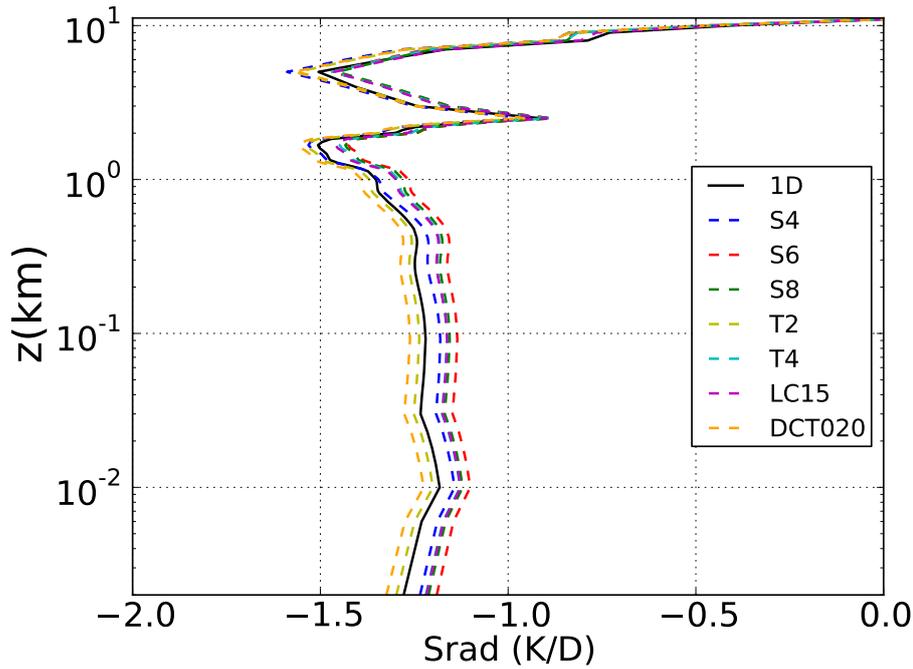


FIGURE 4.6 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $11km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique

Quadrature	<i>DCT020</i> – 2468			<i>LC</i> – 15		
Hauteur	<i>11km</i>	<i>2km</i>	<i>1km</i>	<i>11km</i>	<i>2km</i>	<i>1km</i>
$\Delta S_{\text{rad}}(\%)$	3.51	15.3	22.6	3.98	2.90	3.33
$\Delta Q_{\text{inc}}(\%)$	1.44	2.80	1.81	6.06	0.51	0.53

TABLE 4.3 – Écart relatif entre la solution de référence **Code_Saturne** 1-D et les valeurs calculées par **Code_Saturne** 3-D du terme source radiatif et du flux incident au sol pour les quadratures *DCT020* – 2468 et *LC* – 15

mettent, qualitativement, de distinguer le comportement de certaines quadratures, c'est sur les tableaux 4.1, 4.2 et 4.3 que nous allons nous attarder quelque peu pour mettre en évidence les deux phénomènes numériques caractéristiques de la méthode des ordonnées discrètes – l'effet de rayon et la diffusion numérique.

Il est vrai qu'en utilisant la solution 1-D du flux descendant comme condition à la limite supérieure radiative à $1km$ ou $2km$, nous pensions – peut-être naïvement – améliorer la précision de nos résultats. En se limitant à ces altitudes, nous « raffinons » le maillage. De plus, cela a pour effet de contraindre le système par la solution avec laquelle on se compare. Or, les conclusions sont toutes autres si l'on regarde le tableau 4.1. Pour la quadrature T_2 à 32 directions, l'effet de rayon est la seule explication plausible à l'évolution de l'écart – dans le cas du Cooling-to-Space ; on peut même parler d'erreur puisque la solution 1-D est analytique. Pour

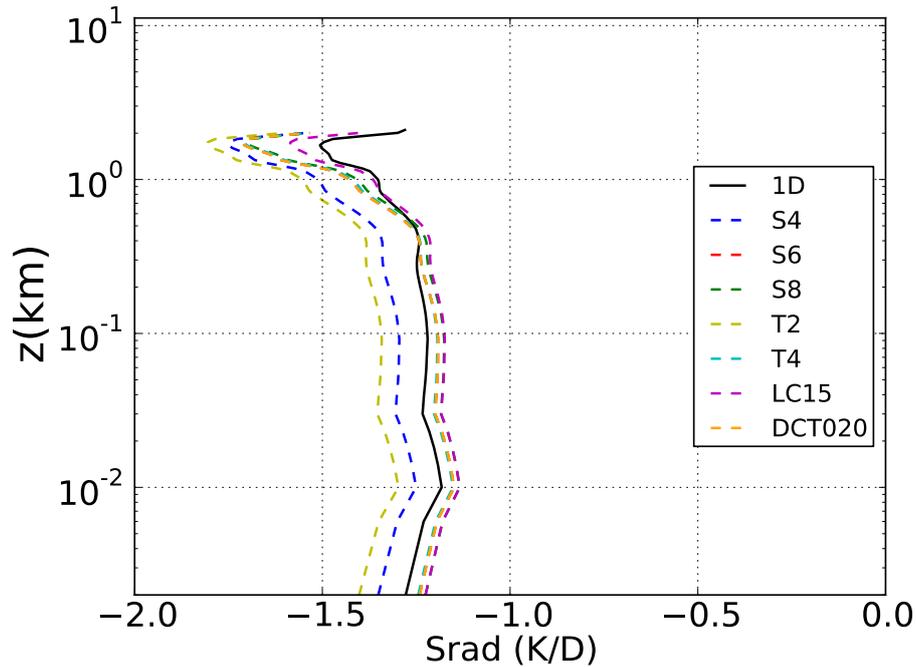


FIGURE 4.7 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $2km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique

une hauteur de $11km$ l'écart est inférieur à 2% sur le flux incident au sol et sur le taux de réchauffement. Cette excellente précision se dégrade au fur et à mesure que l'on diminue la hauteur du domaine et donc que l'on raffine notre maillage. On peut penser, au regard des travaux de Chai et al. (1993), que l'effet de rayon est la cause principale dans la détérioration de la précision de nos calculs.

Cet effet est également remarquable pour la quadrature S_4 , tableau 4.2 mais pas pour la S_6 et la S_8 . On peut donc supposer l'existence d'un seuil du nombre de directions pour une discrétisation donnée, à partir duquel l'effet de rayon est limité. Toutefois, certains écarts nous conduisent à penser que la diffusion numérique – liée au problème de non alignement des directions avec le maillage – limite le gain de précision par l'augmentation du nombre de directions à maillage fixé. Si l'erreur est divisée par 2 pour $2km$ entre S_4 et S_6 , celle-ci ne diminue pas de façon significative entre S_6 et S_8 (4.69% contre 4.61% sur le terme source et 1.51% contre 1.24% sur le flux incident).

Enfin, une quadrature est particulièrement bonne sur l'ensemble de nos cas atmosphériques mais également pour les enceintes de combustion. Il s'agit de la quadrature $LC-15$ de Lebedev (1976) à 120 directions. Si la quadrature $DCT020-2468$ est recommandée par Koch and Becker (2004) au même titre que la $LC-15$, il semblerait qu'elle ne soit pas aussi bien adaptée au calcul du terme source qu'au calcul des flux. Cette deuxième étude sur les quadratures nous a simplement permis de

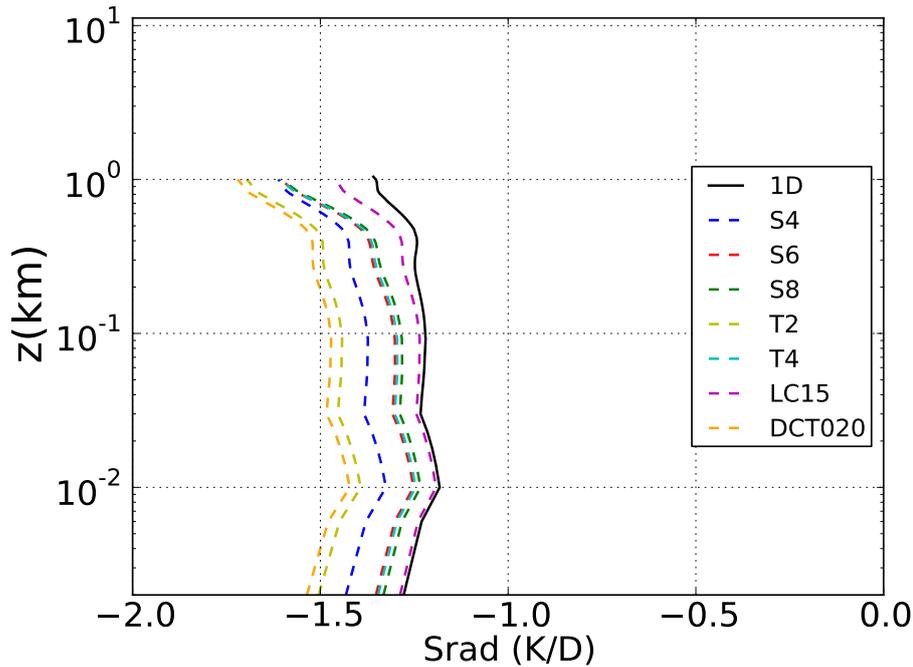


FIGURE 4.8 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $1km$, Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique

retrouver les effets de rayons et les problèmes de diffusion dans la résolution des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes. La discrétisation spatiale dans les codes de brouillard (Tardif, 2007) – maillage très fin près du sol et plus grossier ensuite – ainsi que la limitation de la hauteur du domaine dans les simulations de couche limite nocturne, nous incite donc à la plus grande précaution quant au choix de la quadrature pour la résolution des transferts radiatifs. Au regard de l'étude de sensibilité qui vient d'être détaillée, les simulations suivantes ont été effectuées avec la quadrature de Lebedev-Chebyshev (120 directions discrètes) afin de conserver un ordre d'erreur acceptable sur les flux et le taux de réchauffement.

4.3 Cas où la T_{sol} est différente de la T_{air} ; vérification des fonctions d'émissivité pour les 3 principaux gaz à effet de serre

Le simple fait d'imposer une température du sol différente de celle de la température de l'air active les propriétés radiatives du milieu pour le flux montant qui n'est plus constant. Aussi l'écart mesuré entre les deux codes radiatifs prend maintenant en compte la contribution des flux montants. Si notre modèle de gaz gris exprimé à partir des fonctions d'émissivité se comporte bien pour le flux descendant et sa contribution au taux de réchauffement, rien ne montre pour le moment que notre modèle d'absorption est validé pour le flux montant (et sa contribution au taux de réchauffement).

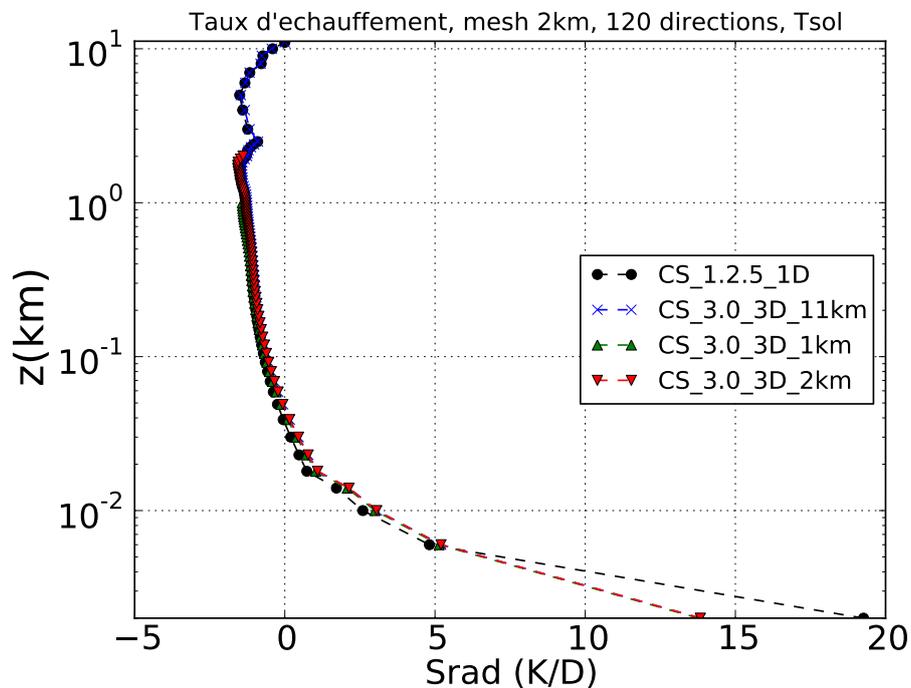


FIGURE 4.9 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$; vapeur d'eau seulement ; 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : 11km, 2km, 1km ; Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique

La figure 4.9 représente le taux de réchauffement dans les mêmes conditions que le cas précédent avec cette fois-ci, une température sol supérieure à la température de l'air de 2 degrés. La vapeur d'eau n'étant pas le seul gaz actif dans l'infrarouge, nous avons rajouté les dimères de la vapeur d'eau (H_2O)₂ puis le dioxyde de carbone CO_2 et l'ozone O_3 . L'effet sur le taux de réchauffement de l'ajout des dimères, figure 4.10, du dioxyde de carbone et de l'ozone, figure 4.11, n'est pas visible. La discontinuité de température entre le sol et l'air masque l'effet de l'ajout de ces gaz à la composition atmosphérique. Cette comparaison n'a pas pour but d'évaluer la contribution de ces agents gazeux sur le taux de réchauffement ou le flux incident au

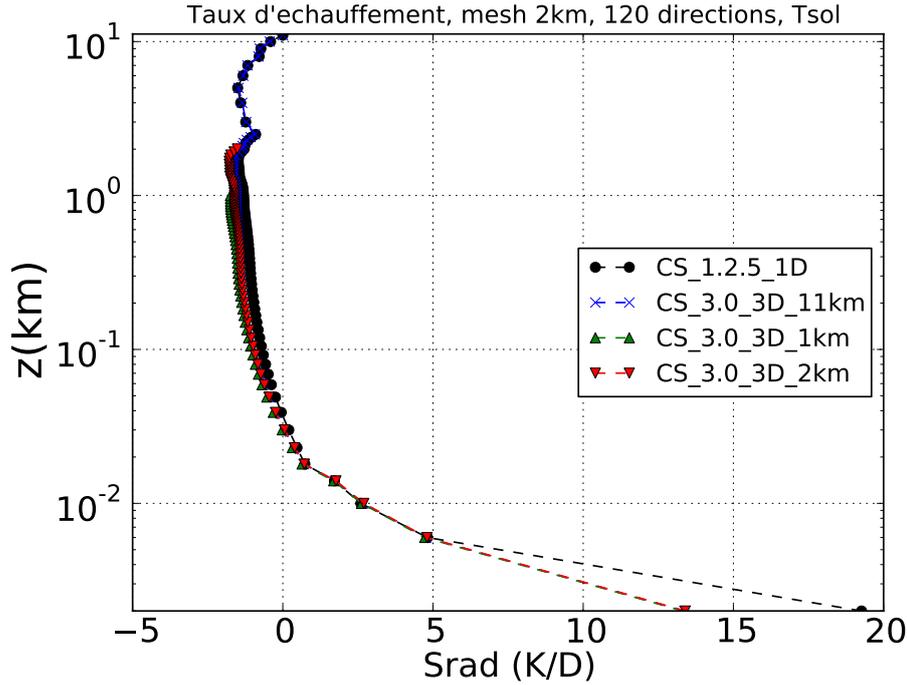


FIGURE 4.10 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$; vapeur d'eau et ses dimères ; 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : 11km, 2km, 1km ; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorptions équivalents, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique

sol, mais simplement de s'assurer que la formulation de notre coefficient d'absorption équivalent montant et descendant, en présence de plusieurs gaz, reste valide et n'introduit pas une source d'erreur supplémentaire.

En reprenant la formulation de notre modèle,

$$k^\uparrow(z) = \frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\uparrow}{\partial z}(0, z) \frac{1}{[1 - \epsilon^\uparrow(0, z)]}$$

$$k^\downarrow(z) = -\frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\downarrow}{\partial z}(z, z_\infty) \frac{1}{[1 - \epsilon^\downarrow(z, z_\infty)]}.$$

on pourrait se demander si on doit calculer un coefficient gris pour chaque gaz avec la fonction d'émissivité correspondante et calculer ensuite un coefficient d'absorption gris total. Cette méthode s'apparenterait à la méthode Weighted Sum of Gray Gas Model (WSSGM) et nécessiterait le calcul supplémentaire de coefficients permettant la combinaison linéaire des coefficients d'absorption des différents gaz. Dans le chapitre 3, nous avons expliqué comment la superposition des gaz était traitée pour le calcul de l'émissivité totale. La formulation de l'émissivité totale, ou équivalente pour les 3 gaz à effet de serre principaux, nous permet donc de calculer un coefficient d'absorption gris total ou équivalent.

Les bons résultats des figures 4.10 et 4.11 permettent de s'assurer de la validité de notre modèle en présence de plusieurs gaz. Si les résultats présentés jusqu'à présent

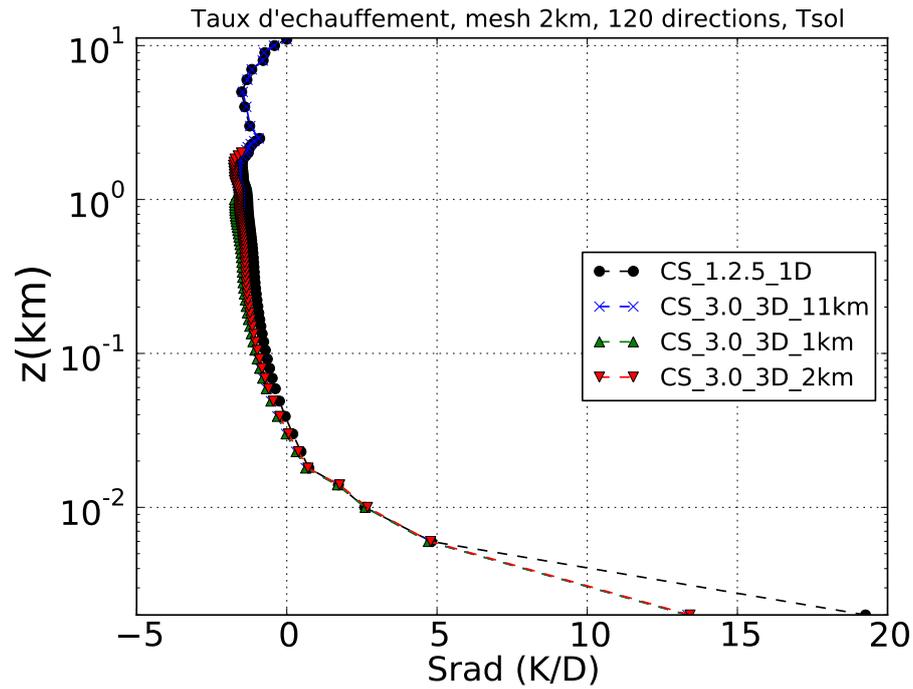


FIGURE 4.11 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} \neq T_{\text{ground}}$, vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green); Code 3-D : DOM + coefficients d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité; terme source-analytique

sont très encourageants, il nous reste toute de même à tester notre modèle global de propriétés radiatives dans l'infrarouge pour une atmosphère non isotherme.

4.4 Comparaison avec un modèle correlated-k distribution

Même si le code 1D radiatif de *Code_Saturne* a démontré sa robustesse et sa capacité à simuler la couche limite atmosphérique sur différentes campagne de mesure – Wangara (Clarke et al., 1971), Cabaw (Wessels, 1984) et ParisFog (Haefelin et al., 2010) –, la validation de notre modèle était également l’occasion de comparer le modèle en émissivité avec un modèle CKD. Pour ce faire nous avons sollicité le Laboratoire d’Optique Atmosphérique (LOA) de Lille qui dispose d’un code radiatif utilisant le modèle CKD. Pour le cas du Cooling-to-Space, les taux de réchauffement et les flux descendants ont été tracés respectivement sur les figures 4.12 4.13 et 4.14 4.15.

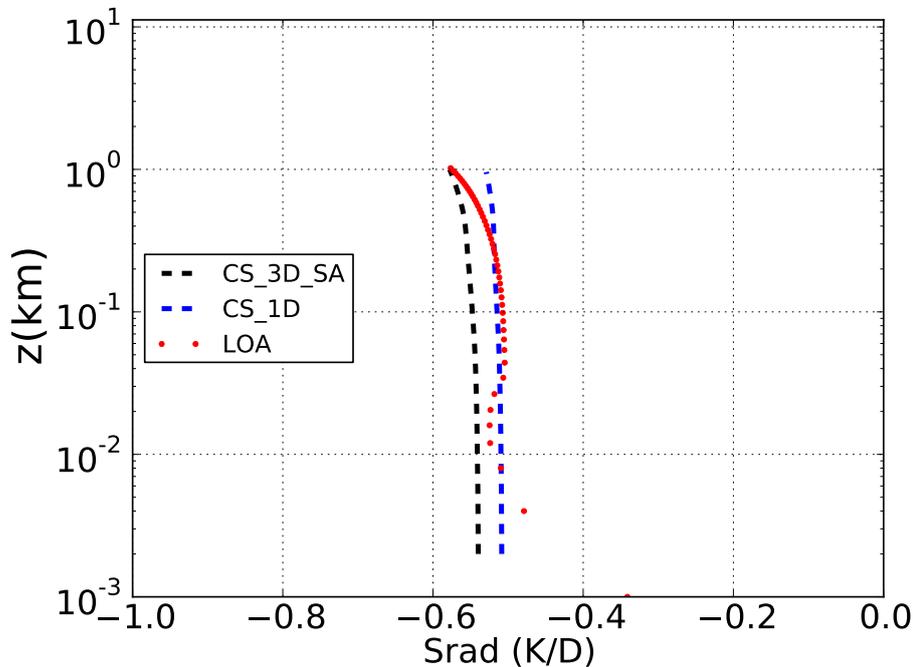


FIGURE 4.12 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d’eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : 1km ; Code 3-D : DOM + coefficient d’absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD

Pour les taux de réchauffement tracés sur les figures 4.12 et 4.13, l’écart relatif moyen entre le modèle CKD du LOA et le modèle radiatif 1-D de *Code_Saturne* est du même ordre de grandeur que celui entre le modèle 1-D et 3-D de *Code_Saturne*. Si la valeur de l’erreur relative commise par rapport au modèle CKD n’est pas donnée, c’est simplement que les points de grilles sur lesquels le terme source radiatif est calculé sont différents. Comme la plupart des codes radiatifs atmosphériques, celui du LOA utilise deux grilles de calculs différentes. Les flux montant et descendant sont calculés sur les points de la première grille dont les abscisses définissent les couches formant l’atmosphère plan-parallèle. Si le premier niveau est à 2m , la

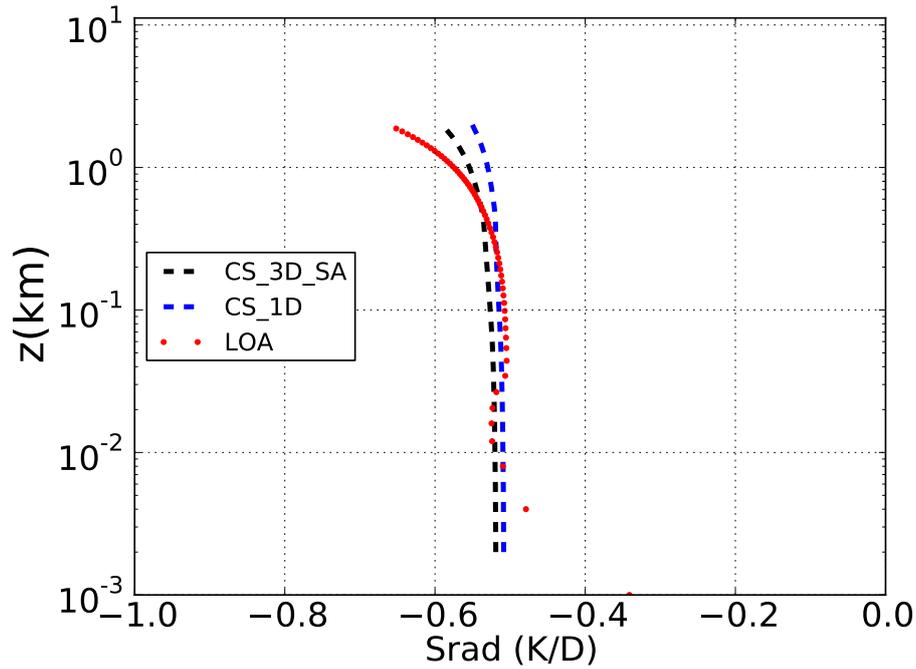


FIGURE 4.13 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d’eau uniquement ; hauteur du domaine de calcul : 2km ; Code 3-D : DOM + coefficient d’absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD

première couche atmosphérique est $0 - 2\text{m}$. Ainsi, le point de calcul du taux de réchauffement se trouvera au milieu de la couche, à 1m d’altitude. Ceci explique le décalage entre les courbes des figures 4.12 et 4.13. Ceci étant, l’erreur relative entre *CS-3D* et *CS-1D* sur le taux de réchauffement est de 5.8% pour une hauteur de 2km avec la quadrature de Lebedev-Chebyshev à 120 directions. Comme les valeurs du taux de réchauffement produites par le modèle CKD sont comprises entre celles de *CS-1D* et *CS-3D*, l’erreur relative entre le modèle CKD et *CS-1D* ou *CS-3D* est inférieure à 5%.

Pour les flux tracés sur les figures 4.14 et 4.15, le modèle en émissivité et notre modèle gaz gris surestiment très légèrement la valeur du flux descendant au sol. L’erreur moyenne sur les flux descendant est inférieure à 2%. La finalité de cette comparaison est l’obtention d’un ordre de grandeur de l’erreur commise par l’utilisation d’un modèle en émissivité pour les applications atmosphériques. Celui-ci est tout à fait acceptable au regard de l’erreur commise par la méthode des ordonnées discrètes.

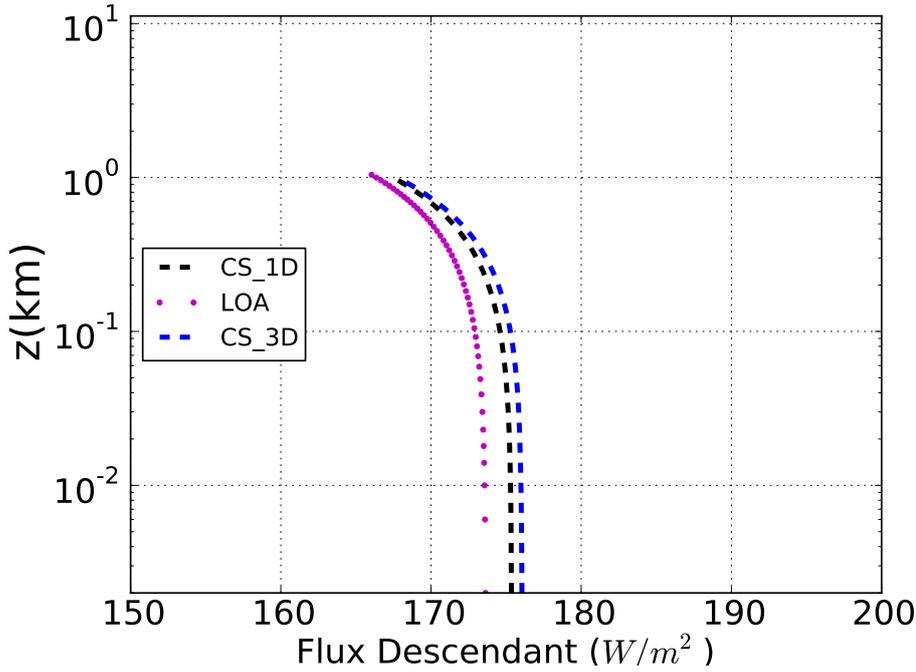


FIGURE 4.14 – Flux descendant (W/m^2) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $1km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD

4.5 Simulations avec des profils atmosphériques réalistes

Toutes les simulations numériques présentées jusqu'à présent ont été effectuées pour une atmosphère isotherme. Or les variations de température, quelles que soient les applications du rayonnement, sont sans aucun doute l'élément qui impacte le plus les résultats obtenus. Ne serait-ce que sur le cas testé dans la sous-section précédente, on remarque que l'influence de la température du sol sur le taux de réchauffement est nettement supérieure à la composition atmosphérique gazeuse – cela n'est plus vrai en présence d'eau liquide. Par ailleurs, la figure 4.16 montre l'influence de la valeur de la température de l'atmosphère sur le taux de réchauffement.

De plus, les variations de température modifient la valeur du coefficient d'absorption. Or les coefficients d'absorption gris ont été formulés pour une atmosphère isotherme. C'est même l'hypothèse d'isothermie, qui permet de relier directement le coefficient d'absorption gris et les émissivités intégrées. Si la formulation

$$\frac{\partial F^\uparrow}{\partial z}(z) = -\frac{5}{3}k(z) [F^\uparrow(z) - \sigma T^4(z)] \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial F^\downarrow}{\partial z}(z) = \frac{5}{3}k(z) [F^\downarrow(z) - \sigma T^4(z)], \quad (4.13)$$

reste vraie dans le cas non isotherme et permet de calculer des coefficients à partir des solutions 1-D, cette formulation n'est pas satisfaisante car elle n'assure

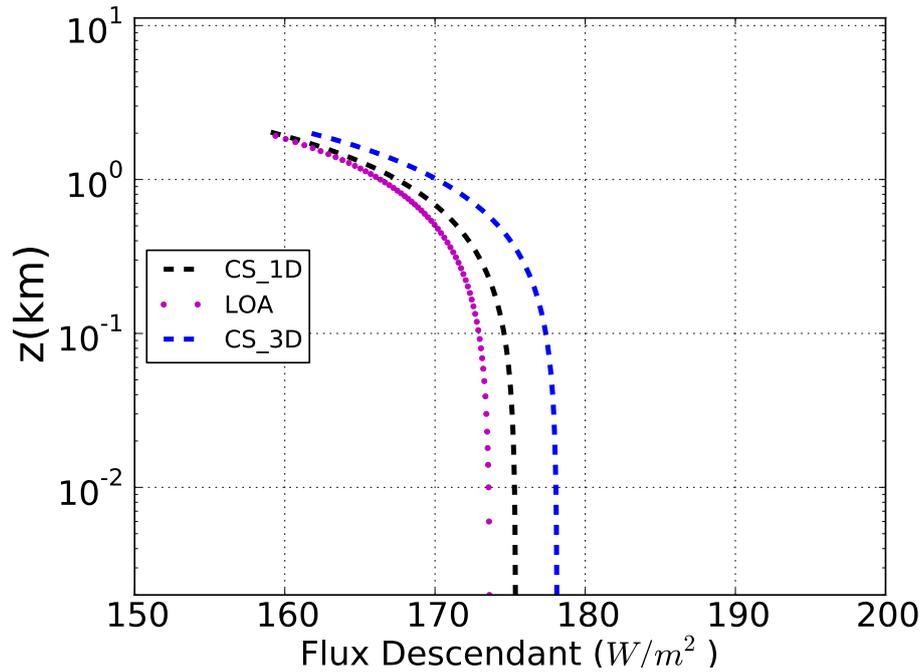


FIGURE 4.15 – Flux descendant (W/m^2) pour une atmosphère isotherme : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}}$, $\rho_{\text{air}}(z) = 1.3$, vapeur d'eau uniquement, ; hauteur du domaine de calcul : $2km$; Code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité ; terme source-analytique, Code LOA : Disort + modèle CKD

pas la positivité des coefficients d'absorption. Aussi nous avons testé la formulation isotherme des coefficients d'absorption,

$$k^{\uparrow}(z) = \frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^{\uparrow}}{\partial z}(0, z) \frac{1}{[1 - \epsilon^{\uparrow}(0, z)]} \quad (4.14)$$

$$k^{\downarrow}(z) = -\frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^{\downarrow}}{\partial z}(z, z_{\infty}) \frac{1}{[1 - \epsilon^{\downarrow}(z, z_{\infty})]}. \quad (4.15)$$

, dans le cas d'une atmosphère non isotherme, dans l'équation résolue par **Code_Saturne**, écrite ci-dessous :

$$\left(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}\right) I(s, \vec{S}) = -k^{\uparrow\downarrow}(s)I(s, \vec{S}) + k^{\uparrow\downarrow}(s)I^o(s), \quad (4.16)$$

où $k^{\uparrow\downarrow}$ représente le coefficient d'absorption gris montant ou descendant, formulé pour une atmosphère isotherme.

Pour effectuer nos comparaisons, nous avons sélectionné des profils atmosphériques provenant de la période d'observation intensive (POI) numéro 13 durant la campagne de mesure ParisFog 18/19-02-2007. Cette période contient un cycle de vie complet d'un brouillard radiatif.

4.5.1 Condition ciel clair

En raison de la forte valeur de l'émissivité du sol, une inversion de température se produit dans la partie basse de l'atmosphère par refroidissement infrarouge du

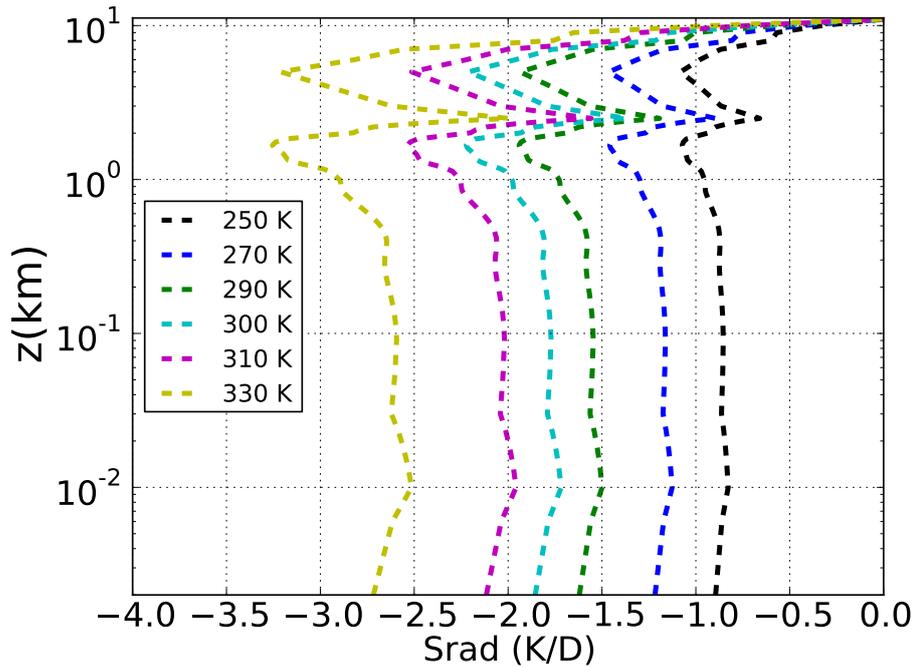


FIGURE 4.16 – Taux de réchauffement (K/Day) pour une atmosphère isotherme pour différentes valeurs de température de l'atmosphère isotherme calculés avec le code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris; terme source semi-analytique; $T_{air} = T_{ground}K$, vapeur d'eau seulement, hauteur du domaine de calcul : $11km$.

sol. L'air en contact avec le sol atteint donc les conditions de saturation ce qui entraîne la formation de gouttelettes de nuage. Il est donc important que le modèle d'absorption infrarouge soit capable de simuler ce refroidissement pour permettre la production de gouttelettes d'eau. La figure 4.17 représente les profils de températures à différentes heures de la nuit de la POI13.

Les taux de réchauffement à 18h et 21h sont représentés respectivement sur les figures 4.18 et 4.19. Bien que notre paramétrisation ait été formulée en utilisant les solutions analytiques du cas isotherme, elle donne de bons résultats dans les cas non isotherme. Le faible écart entre le modèle en émissivité et la méthode des ordonnées discrètes montre que l'hypothèse d'isothermie dans l'expression des coefficients d'absorption a une faible influence sur les taux de réchauffement. En réalité, les coefficients d'absorption de notre modèle dépendent de la température à travers le chemin optique corrigé u_g et surtout de la fonction d'échelle \mathcal{F} :

$$u_g(z', z) = \int_{z'}^z \rho_g(z'') \mathcal{F}(T_0, P_0, T, P)^n dz'' . \quad (4.17)$$

Pour le calcul à 18h, figure 4.18, on remarque un écart important sur la première cellule de l'ordre de 20%. Cet écart se trouve également dans les résultats présentés pour le cas isotherme où la température est supérieure à la température de l'air, figures 4.9, 4.10 et 4.11. On ne peut donc pas attribuer l'erreur commise sur le calcul du terme source de la première cellule à l'hypothèse d'isothermie.

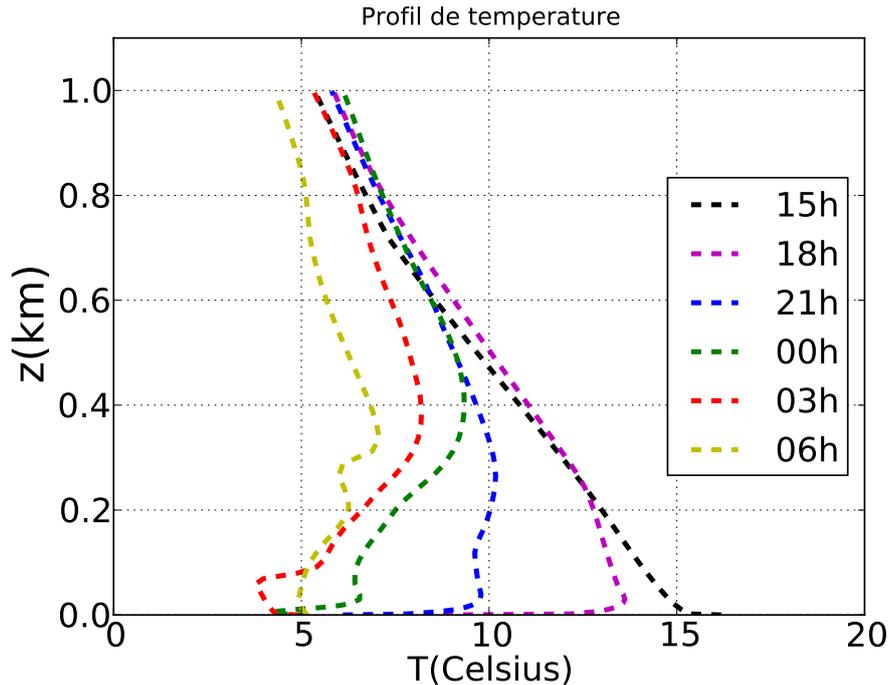


FIGURE 4.17 – Profil de température à 18h, 21h, 00h, 03h et 06h sur les 1000 premiers mètres

4.5.2 Conditions ciel nuageux

Pour pouvoir simuler quelques heures de formation de brouillard, il est important de tester la réponse de notre modèle gaz gris à la présence d'eau liquide. Nous avons souligné dès le premier chapitre que nous ne prenions pas en compte les processus de diffusion. Pourtant, dès lors que l'on s'intéresse aux transferts radiatifs dans un milieu contenant des gouttelettes d'eau et donc des particules sphériques, on est en droit de s'interroger sur la validité de notre approximation quant à l'absence de diffusion dans l'infrarouge. Si la diffusion a longtemps été négligée dans l'infrarouge, c'est en premier lieu car l'absorption est le processus dominant et que la diffusion est d'une importance secondaire dans le rayonnement de grandes longueurs d'onde (Chou et al., 1999). La seconde raison est plus pragmatique. Il s'agit surtout du coût calcul nécessaire à la prise en compte de la diffusion dans les solveurs utilisant la méthode des ordonnées discrètes. Pourtant, négliger les processus de diffusion dans certaines applications – comme la modélisation inverse pour calculer un rayon équivalent de gouttes de nuages (Dubuisson et al., 2005) – est une approximation qui peut conduire à commettre des erreurs significative sur les flux et les taux de réchauffement (Chou et al., 1999).

Cette paramétrisation radiative est donc adéquate pour des applications où l'absorption est le processus dominant. Pour nos inter-comparaisons entre les deux codes radiatifs de *Code_Saturne*, cette approximation n'induit pas d'écart supplémentaire car la diffusion est négligée dans les deux codes.

Dans le modèle en émissivité, l'absorption à travers un nuage peut être pa-

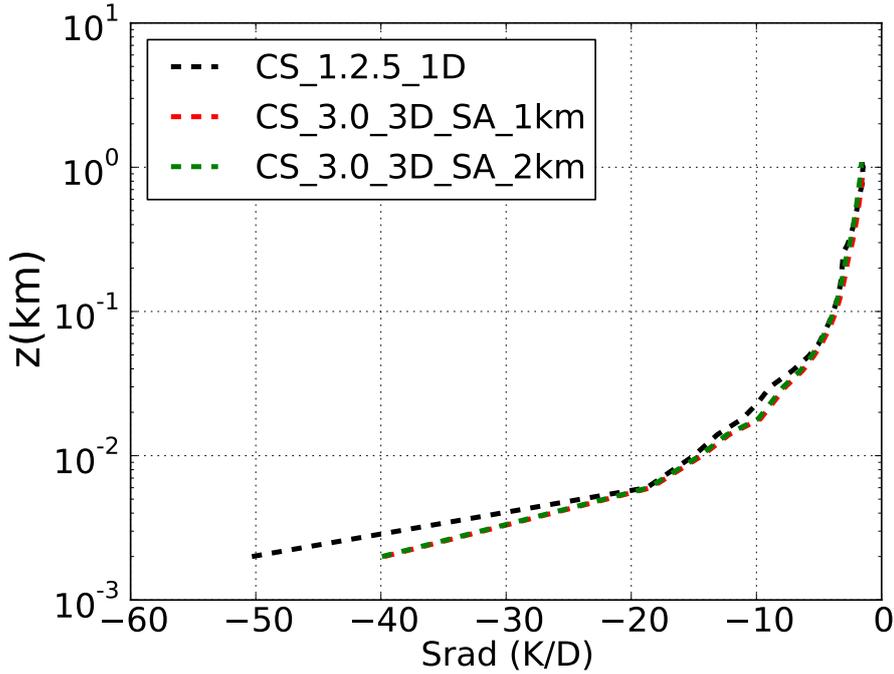


FIGURE 4.18 – Taux de réchauffement (K/Day) à 18h, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green); 3 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : 11km,2km,1km; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité

ramétrisée en utilisant une transmittivité équivalente de la couche contenant des gaz et de l'eau liquide. Cette transmittivité équivalente est simplement le produit de la transmittivité des gaz et de la transmittivité de l'eau liquide (4.18)

$$\mathcal{T}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) = \mathcal{T}_g\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \mathcal{T}_{\text{liq}}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \quad (4.18)$$

A cette transmittivité totale { gaz + liquide } intégrée sur le spectre, on associe l'émissivité totale,

$$\epsilon\left(z', z\right) = 1 - \mathcal{T}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right), \quad (4.19)$$

qui nous permet d'exprimer nos coefficients d'absorption gris en conservant la formulation

$$k^\uparrow(z) = \frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\uparrow}{\partial z}(0, z) \frac{1}{[1 - \epsilon^\uparrow(0, z)]}$$

$$k^\downarrow(z) = -\frac{3}{5} \frac{\partial \epsilon^\downarrow}{\partial z}(z, z_\infty) \frac{1}{[1 - \epsilon^\downarrow(z, z_\infty)]}.$$

La formulation ci-dessus suppose donc un coefficient d'absorption qui ne dépend que de l'altitude z . Si la distribution des gaz est présumée homogène horizontalement, les coefficients d'absorption gazeux ne dépendent pas de x ou y . En revanche

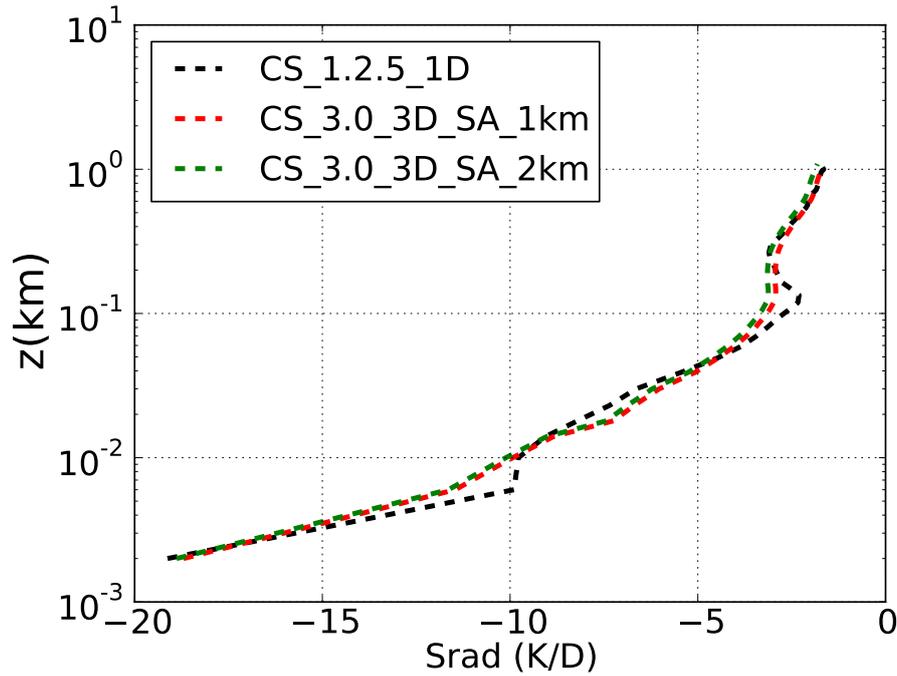


FIGURE 4.19 – Taux de réchauffement (K/Day) à 21h, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green); 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité

rien ne justifie que cette hypothèse est vraie pour la distribution de l'eau liquide nuageuse. C'est pourtant ce qu'induit la formulation des coefficients d'absorption utilisant l'émissivité totale { gaz + liquide }.

C'est donc pour cette raison qu'il est préférable de séparer l'absorption due à l'eau liquide nuageuse et celle due aux gaz atmosphériques. On définit ainsi le coefficient d'absorption total { gaz + liquide } égal à la somme des coefficients d'absorption liquide et gazeux. Cette somme est pondérée par la fraction volumique d'eau liquide dans la cellule considérée, également appelée nébulosité fractionnaire :

$$k^{\uparrow\downarrow} = x_v k_{liq} + (1 - x_v) k_g^{\uparrow\downarrow} \quad (4.20)$$

où $k_{liq} = \rho_l \kappa_l$ est le coefficient d'absorption de l'eau liquide, x_v est la fraction volumique d'eau liquide dans la cellule considérée (ou nébulosité fractionnaire) et κ_l est le « mass absorption coefficient » pour l'eau liquide nuageuse. Ce coefficient est souvent supposé constant autour de $120g/m^2$ (Stephens, 1984) ou bien variant selon la distribution de la taille des gouttes. Celle-ci permet de calculer un rayon de goutte équivalent et de calculer ce coefficient pour chaque cellule. La distribution de la taille des gouttes utilisée dans les schémas de microphysique de l'eau suit généralement une loi log-normale ou gaussienne décentrée. Nous reviendrons sur la microphysique en détail dans le chapitre suivant.

Ainsi définis, les coefficients d'absorption montant et descendant permettent de découpler l'absorption des gaz de celle de l'eau liquide et d'obtenir un coefficient d'absorption 3-D. La comparaison, faite en condition nuageuse, suppose une concentration en eau liquide constante horizontalement pour ne pas introduire une source d'écart supplémentaire et de ne vérifier que la formulation de l'absorption grise proposée dans le chapitre précédent.

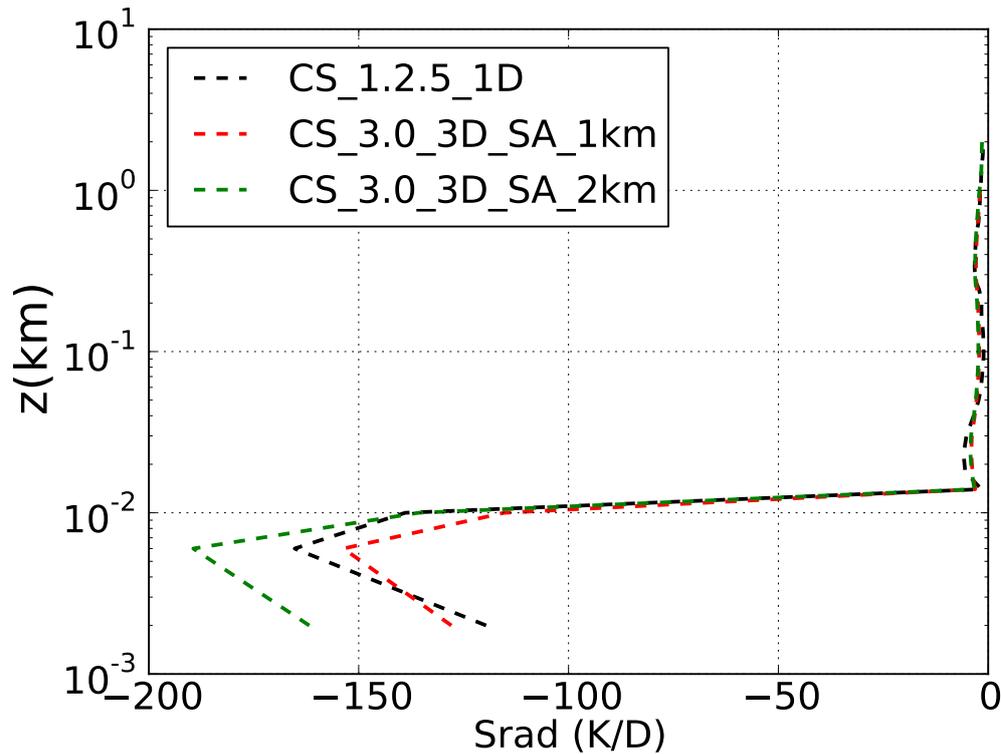


FIGURE 4.20 – Taux de réchauffement (K/Day) à 00h, profil d'eau liquide, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green); 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : 2km,1km; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité

Durant cette période d'observation intensive, le brouillard s'est formé aux alentours de 22h30. À minuit, la couche de brouillard s'est développée pour atteindre une épaisseur de quelques dizaines de mètres. Une des signatures de la formation du brouillard, tout du moins de la présence d'eau liquide nuageuse, est ce très fort taux de refroidissement au sommet de cette couche nuageuse que l'on observe sur la figure 4.20. En effet, le brouillard joue le rôle d'un corps gris se refroidissant à sa surface par émission de rayonnement infrarouge.

Par ailleurs, il réfléchit une partie du rayonnement infrarouge montant émis par le sol, jouant ainsi le rôle de couvercle radiatif sur la partie atmosphérique proche du sol. C'est pourquoi, lorsque le brouillard s'est suffisamment développé verticalement et a atteint une certaine hauteur, on observe un réchauffement dans la couche

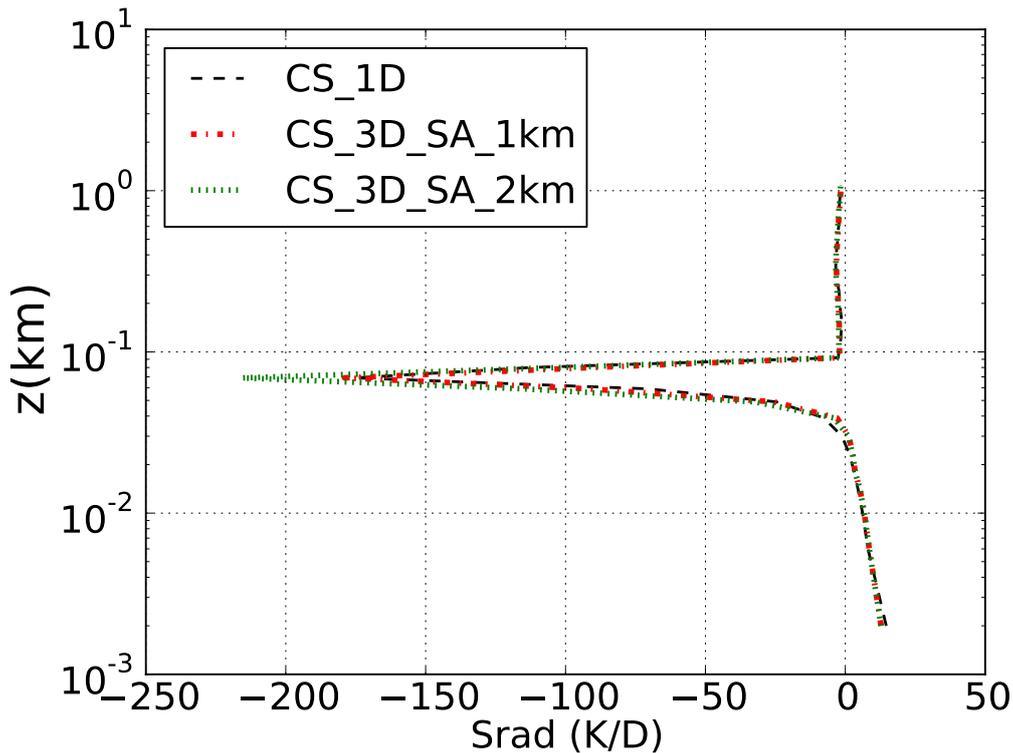


FIGURE 4.21 – Taux de réchauffement (K/Day) à 03h, profil d'eau liquide, profil de vapeur d'eau et ses dimères, dioxyde de carbone (360ppm), Ozone (profil de green); 2 hauteurs différentes pour le domaine de calcul : $2km, 1km$; code 3-D : DOM + coefficient d'absorption gris, terme source semi-analytique; Code 1-D : méthode à deux flux + modèle en émissivité

nuageuse en contact avec le sol (figure 4.21).

S'il est vrai que le code 3-D utilise un coefficient d'absorption exprimé à l'aide de l'hypothèse d'isothermie, il est néanmoins difficile d'envisager que cette approximation est la seule source d'écart entre les résultats produits par les codes radiatifs 1-D et 3-D.

Le choix du schéma de condensation est susceptible d'avoir un impact important sur les calculs radiatifs. Dans le cas du schéma de condensation « tout ou rien », dès que l'humidité dépasse les 100%, on considère que toute la maille est saturée. Ainsi pour chaque cellule du domaine de calcul, soit elle contient du gaz soit de l'eau liquide. Dans nos simulations atmosphériques, les tailles de maille sont telles que le schéma « tout ou rien » ne reflète guère la réalité. Pour nos comparaisons de codes, il s'agit là de ne pas rajouter une source d'écart possible entre le modèle en émissivité et le modèle gaz gris. En effet, si la nébulosité fractionnaire est utilisée comme pondération pour le calcul des flux dans le modèle en émissivité, elle sert de pondération pour le calcul des coefficients d'absorption montant et descendant – fraction volumique d'eau liquide dans la cellule. En choisissant le modèle « tout ou rien », la nébulosité fractionnaire vaut 1 ou 0 suivant la présence d'eau liquide ou

non dans la cellule considérée. Ainsi le coefficient d'absorption vaut soit le coefficient d'absorption de l'eau liquide, soit celui gazeux.

TABLE 4.4 – Écart relatif moyen entre les codes radiatifs 1-D et 3-D du flux incident à la surface Q_{inc} du taux de réchauffement S_{rad}

Conditions+time	hauteur du domaine	$\Delta Q_{\text{inc}}\%$	$\Delta S_{\text{rad}}\%$
Isothermal $T_g = T_A$ $(H_2O)_v$ only 12 :00 am	1km	0.5	3.3
	2km	0.5	2.9
	11km	6.0	4.0
Isothermal $T_g \neq T_A$ $(H_2O)_v$ only 12 :00 am	1km	0.1	11.3
	2km	0.1	11.3
	11km	6.0	10.4
Isothermal $T_g \neq T_A$ $(H_2O)_v, (H_2O)_2, CO_2$ and O_3 12 :00 am	1km	0.0	12.6
	2km	0.4	12.1
	11km	6.0	9.8
Clear sky 6 :00 pm	1km	5.4	11.2
	2km	9.7	10.0
Clear sky 9 :00 pm	1km	2.5	6.2
	2km	6.9	8.0
Foggy 12 :00 pm	1km	4.8	14.1
	2km	7.7	11.4
Foggy 3 :00 am	1km	0.8	24.8
	2km	0.9	26.2

Conclusion

Une nouvelle paramétrisation de l'absorption dans le domaine infrarouge a été développée pour la résolution tridimensionnelle de l'équation des transferts radiatifs. Ce modèle a été construit en conduisant les calculs jusqu'à l'obtention d'une solution analytique 1-D sous l'hypothèse d'isothermie dans le cas d'une atmosphère supposée plane et parallèle. Cette solution analytique 1-D des flux montant et descendant a permis d'exprimer notre coefficient d'absorption gris en fonction des émissivités.

La représentation spectrale des flux montant et descendant nous a conduit à considérer des coefficients d'absorption gris montant et descendant comme l'avait suggéré Edwards (1996). En séparant les directions montantes et descendantes, cette paramétrisation de l'absorption infrarouge s'apparente à un pseudo modèle à deux bandes spectrales.

Plusieurs tests ont été effectués pour valider ce nouveau modèle. En condition ciel clair, stable ou instable et en conditions nuageuses, l'association de ce modèle de propriétés radiatives avec la méthode des ordonnées discrètes donne de bons résultats, en accord avec la solution du code radiatif 1-D de référence.

En testant la sensibilité des flux et du taux de réchauffement à la condition à la limite supérieure, nous avons également montré qu'il était possible de réduire considérablement la taille du domaine à 1 ou 2 kilomètres.

De plus, la séparation de l'absorption due à l'eau liquide et aux gaz permet de prendre en compte les hétérogénéités spatiales de la distribution du champ d'eau liquide.

Néanmoins, l'approximation diffuse utilisée dans le calcul des chemins optiques, limite l'intérêt de l'intégration angulaire. Aussi, Ponnulakshmi (2014) a proposé une formulation directionnelle de l'émissivité. En utilisant cette formulation, nous sommes capable de donner une expression des coefficients d'absorption gris en fonction de l'émissivité directionnelle :

$$k^\uparrow(z) = 1/\mu \frac{\partial \epsilon^\uparrow}{\partial z}(0, z, 1/\mu) \frac{1}{[1 - \epsilon^\uparrow(0, z, 1/\mu)]} \quad (4.21)$$

$$k^\downarrow(z) = -(1/\mu) \frac{\partial \epsilon^\downarrow}{\partial z}(z, z_{+\infty}, 1/\mu) \frac{1}{[1 - \epsilon^\downarrow(z, +\infty, 1/\mu)]} \quad (4.22)$$

où $\epsilon^\uparrow(z', z, 1/\mu)$ est défini pour un chemin optique divisé par μ :

$$\epsilon : \left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^\infty \left[1 - \mathcal{T}_\lambda \left(z, z', \frac{1}{\mu}\right)\right] \pi I_\lambda^o(z') d\lambda. \quad (4.23)$$

La formulation des coefficients d'absorption (4.21) et (4.22) permet ainsi de prendre la dépendance angulaire du chemin optique. Cela permettra également de différencier un peu plus les résultats selon la méthode de quadrature utilisée.

Par ailleurs, cette paramétrisation de l'absorption infrarouge est indépendante des fonctions d'émissivité utilisées. Aussi, si nous avons fait le choix des fonctions de Sasamori (1968), nous aurions pu tester celles de Zdunkowski and Johnson (1965) ou encore celles de Shaffer and Long (1975).

Enfin, l'utilisation d'un solveur 3-D permet également la prise en compte des effets radiatifs 3-D d'une géométrie complexe pour un coût calcul faible. Notre modèle de rayonnement infrarouge a été construit de façon à minimiser le temps calcul d'une itération de rayonnement en vu d'un couplage avec la résolution des équations régissant l'écoulement atmosphérique. L'objet du chapitre suivant est de présenter quelques résultats de simulation dynamique de la formation d'un brouillard radiatif en présence d'un bâti simplifié. Avant cela, nous allons nous intéresser à la Physique du brouillard du point de vue de la mécanique des fluides mais également de celui de la thermodynamique de l'eau.

Chapitre 5

Modélisation couplée entre le rayonnement et la thermodynamique : Application à la modélisation du brouillard radiatif 3-D

Vague et nébuleux est le commencement de toute chose ; l'aboutissement ne l'est pas [...]. La vie, comme tout ce qui est vivant, est conye dans le brouillard et non dans le cristal. Et qui sait si le cristal n'est pas brouillard altéré...

— Gibran Khalil Gibran, Le prophète

La couche limite atmosphérique est la partie basse de l'atmosphère qui est influencée directement par la surface terrestre, et dont le temps de réponse aux forçages du sol est de l'ordre de l'heure. Parmi ces différents forçages, on trouve les frottements dus à la présence de bâti, de végétation ou d'un terrain complexe, les transferts de chaleur ou encore l'émission de polluants (Stull, 1988). Afin de décrire quantitativement ou de prévoir l'état de la couche limite, il est donc nécessaire de s'intéresser aux équations de la mécanique des fluides pour expliquer le comportement dynamique et thermodynamique des gaz de notre atmosphère. La première partie du chapitre présentera brièvement quelques équations régissant la thermodynamique atmosphérique ainsi que les processus microphysiques à l'origine de la formation de brouillard.

Dans le chapitre précédent, nous avons effectué des comparaisons sur les sorties des modèles radiatifs 1-D et 3-D à partir des profils atmosphériques donnés. Les résultats ont permis de valider notre modèle d'absorption pour les gaz et les nuages dans l'infrarouge. Qu'en est-il de son couplage avec la résolution des écoulements

atmosphériques à l'échelle locale, en milieu bâti ?

Afin de valider notre modèle d'absorption pour une évolution dynamique, nous comparerons les résultats de simulations obtenus avec notre modèle gaz gris couplé à la méthode des ordonnées discrètes et ceux obtenus par le modèle radiatif 1-D (Zhang, 2011; Zhang et al., 2014) sur un cas de formation et d'évolution d'un brouillard radiatif. Cette étude permettra notamment de montrer les conséquences sur les effets radiatifs 3-D de la présence de bâti, mais également de la distribution spatiale hétérogène du contenu en eau liquide.

Sommaire

5.1	Une introduction sur la mécanique des fluides et la thermodynamique du module atmosphérique de <i>Code_Saturne</i>	95
5.1.1	La température potentielle	95
5.1.2	La température potentielle liquide	96
5.1.3	Le contenu total en eau liquide + vapeur	96
5.1.4	Le schéma de condensation	96
5.1.5	L'eau liquide nuageuse et précipitante	97
5.2	ParisFog	97
5.2.1	La campagne de mesure	99
5.2.2	Choix de la POI13 : Cas d'un brouillard radiatif	99
5.3	Validation du couplage dynamique du modèle d'absorption 3-D	99
5.3.1	Cas de la colonne périodique en translation : Comparaison des modèles radiatifs 1-D et 3-D	100
5.3.2	Sensibilité à la méthode de quadrature	107
5.3.3	Sensibilité à la fréquence d'appel du module radiatif	111
5.4	Cas d'étude avec bâtiments	116
5.4.1	Paramètres de la simulation	116
5.4.2	Les conditions aux limites radiatives	119
5.4.3	Description qualitative de l'évolution du brouillard	120
5.4.4	Les effets radiatifs 3-D	122

5.1 Une introduction sur la mécanique des fluides et la thermodynamique du module atmosphérique de *Code_Saturne*

Code_Saturne est un code de mécanique des fluides auquel se sont greffés des modèles de physiques particulières comme le module radiatif 3-D. Le module atmosphérique était, quant à lui, un code à part, spécifique aux écoulements de couche limite atmosphériques, répondant au doux nom de Mercure. Afin de disposer des développements du noyau de *Code_Saturne*, Mercure est devenu un module de *Code_Saturne*.

Les travaux de Bouzereau (2004) ont permis la mise en oeuvre de la microphysique de l'eau dans *Code_Saturne*, ce qui a notamment rendu possible la modélisation des panaches aéroréfrigérants des centrales nucléaires. Zhang (2011) a, quant à lui, simulé un cycle complet de formation, évolution et dissipation du brouillard radiatif avec la version 1.3.3 du code et ce cas a été migré sur la version 3.0 par Jiang (2014). Sur la base de ces travaux, nous avons couplé notre modèle radiatif 3-D à la thermodynamique de *Code_Saturne* sur ce cas de brouillard radiatif.

Dans ce chapitre, nous nous intéresserons à l'impact du terme source radiatif sur l'équation de l'énergie, à savoir la troisième équation de Navier-Stokes. Les équations de continuité de la masse et de la quantité de mouvement pour un écoulement de couche limite atmosphérique modélisées dans *Code_Saturne* sont détaillées notamment par Bouzereau (2004), Zhang (2011) ou encore Dall'Ozzo (2013). Cette équation apparaît dans la littérature sous diverses formes : équation sur l'énergie totale ou interne, équation sur l'enthalpie ou sur la température.

Une particularité du module atmosphérique est de transporter non pas la température, mais la température potentielle liquide.

5.1.1 La température potentielle

Θ , la température potentielle, définit la température d'une parcelle d'air ramenée adiabatiquement à la pression atmosphérique de référence, $P = 1000hPa$. Elle permet ainsi d'étudier les variations de température de l'atmosphère en s'affranchissant des changements de température induits par les variations de pression sur la verticale, qui sont très importantes pour le milieu atmosphérique :

$$\Theta = T \left(\frac{P_0}{P} \right)^{R/C_p} \quad (5.1)$$

où T est la température, R est la constante des gaz parfaits de l'air et C_p est la capacité calorifique de l'air à pression constante. Ce scalaire thermique a le mérite d'être conservatif au cours des transformations adiabatiques dans l'atmosphère en l'absence de changement d'état. Dès lors qu'on souhaite simuler la formation de nuages chauds ou de brouillard, il convient de prendre en compte les changements de phase de la vapeur d'eau contenue dans l'atmosphère.

Dans un souci de transporter un scalaire thermique conservatif au travers des changements d'état, on définit la température potentielle liquide.

5.1.2 La température potentielle liquide

La température potentielle liquide θ_l est la température potentielle d'une parcelle d'air dont on aurait fait évaporer tout son contenu en eau liquide. Son expression est :

$$\Theta_l = \Theta \exp\left(\frac{L_v q_l}{C_p T}\right). \quad (5.2)$$

L_v est la chaleur latente de vaporisation et q_l , le contenu spécifique en eau liquide. Conserver l'expression (5.2) conduit à résoudre une équation non linéaire pour passer de la température potentielle liquide à la température potentielle ou réelle. En remarquant que $L_v q_l / C_p T \ll 1$, les modèles numériques ne conservent que le développement limité de $\exp(L_v q_l / C_p T)$ à l'ordre 1. Ainsi, la température potentielle liquide transportée par les équations de *Code_Saturne* est :

$$\Theta_l = \Theta - \frac{\Theta}{T} \frac{L}{C_p} q_l. \quad (5.3)$$

5.1.3 Le contenu total en eau liquide + vapeur

Le système {eau liquide + vapeur} étant conservatif à travers les transformations thermodynamiques incluant des changements d'état, le contenu total en eau, noté q_w est donc la variable retenue par Bouzereau (2004) le modèle de nuages chauds (pas d'eau sous forme de glace) de *Code_Saturne*.

$$q_w = q_l + q_v \quad (5.4)$$

Le contenu spécifique de vapeur d'eau est déduit du diagnostic de l'eau liquide :

$$q_l = (q_w - q_s(T, P)) \mathcal{H}(q_w - q_s(T, P)) \quad (5.5)$$

où \mathcal{H} est la fonction de Heaviside et $q_s(T, P)$ le contenu spécifique en vapeur d'eau à saturation, qui dépend de T et P . Cependant, le calcul de T nécessite la connaissance de Θ_l qui dépend de q_l que l'on cherche à diagnostiquer. En reprenant les travaux de Sommeria and Deardorff (1977) et ceux de Mellor (1977), Bouzereau (2004) détaille les différentes hypothèses et étapes de calcul de q_s permettant de diagnostiquer l'eau liquide.

5.1.4 Le schéma de condensation

Le code dispose de deux schémas de condensation. Un schéma appelé « tout ou rien ». Soit la maille est totalement saturée, soit elle ne l'est pas du tout. Le passage à la saturation se fait donc lorsque le seuil est dépassé autrement dit lorsque $q_w = q_s$.

L'autre schéma – plus utilisé et physiquement plus réaliste – est une paramétrisation de la condensation sous maille pour éviter que la maille se sature en bloc, ce qui n'est

pas réaliste. Cette paramétrisation permet de décrire le processus d’entraînement de l’air clair dans l’air nuageux en fournissant une nébulosité fractionnaire, calculée à partir d’une distribution statistique des fluctuations sous-maille (turbulence) des variables thermodynamiques q_w et Θ_l .

5.1.5 L’eau liquide nuageuse et précipitante

Afin de distinguer l’eau liquide précipitante et nuageuse, Bouzereau (2004) a complété son modèle avec une équation sur le nombre de gouttes nuageuses N_c et une équation sur le nombre de gouttes de pluie N_r . Le modèle transporte ainsi deux distributions de taille de gouttes de type log-normale. A travers ces deux équations, le modèle de microphysique peut décrire de nombreux phénomènes dont nous allons donner une liste exhaustive :

- l’évaporation/condensation est le changement de phase entre l’eau liquide nuageuse et la vapeur d’eau,
- la nucléation est l’activation des noyaux de condensation en gouttes nuageuses,
- l’auto-conversion est le processus de coalescence entre deux gouttes nuageuses en collision qui vont former une goutte de pluie,
- l’accrétion est la collection des gouttes de nuages par une goutte de pluie dans sa chute,
- l’auto-collection est le processus de coalescence entre deux gouttes nuageuses en collision qui vont n’en former qu’une,
- la rupture se produit lors de la collision de deux gouttes qui vont se dissocier en plusieurs gouttes,
- l’évaporation décrit le changement d’état d’une goutte de pluie de passage dans une couche atmosphérique non saturée en vapeur d’eau,
- la précipitation décrit la chute des gouttes de pluie,
- la sédimentation décrit la chute des gouttes nuageuses.

Le modèle de microphysique implanté dans *Code_Saturne* décrit l’ensemble de ces processus. Le lecteur pourra se référer à Bouzereau (2004) et Zhang (2011) pour une description détaillée des paramétrisations de la microphysique offertes à l’utilisateur.

5.2 ParisFog

La campagne de mesure ParisFog (Haefelin et al., 2010) a été menée afin de documenter de manière simultanée l’ensemble des processus intervenant dans le cycle de formation du brouillard, à savoir la microphysique, la turbulence et le rayonnement. Si certains facteurs clés – comme le refroidissement radiatif, l’humidité, le vent vertical et horizontal (Duynderke, 1991)– ont été identifiés dans la signature de la formation du brouillard, il reste à ce jour encore des zones d’ombre quant à l’effet de la présence d’aérosols sur les propriétés optiques, ou quant à l’influence de la turbulence. Cette campagne était donc l’occasion de mesurer et de surveiller simultanément tous les processus importants jouant un rôle dans le cycle de vie du brouillard. Elle a permis d’enregistrer de nombreuses situations de formation ou non-formation de brouillard, offrant ainsi une quantité de mesures expérimentales pour mieux comprendre la physique des processus évoqués ci-avant. Ces données sont

également utiles pour la calibration des paramétrisations numériques implantées dans les modèles de prévisions opérationnels et pour la comparaison des codes de calcul aux mesures expérimentales.

5.2.1 La campagne de mesure

Comme son nom évocateur semble l'indiquer, la campagne de mesure ParisFog a eu lieu en région parisienne. Ce choix était légitimé par la présence de 29 stations météorologiques de surface et 7 zones où la visibilité et la hauteur de la base des nuages sont mesurées en continu, mais également par la présence du Site Instrumental de Recherche en Télédétection Atmosphérique (SIRTA) (Haefelin et al., 2005) au sein du campus de l'école Polytechnique. Le SIRTA comporte de nombreux instruments dont la liste est donnée sur la figure 5.1. La complémentarité offerte par l'instrumentation a permis de documenter près de 100 situations de brouillard ou de conditions proches. Parmi elles, on trouve 16 périodes d'observations intensives (POI) durant lesquelles les données ont été complétées par un ballon-sonde muni de capteurs de température, pression, humidité, vitesse et direction du vent.

5.2.2 Choix de la POI13 : Cas d'un brouillard radiatif

Entre le 18 et le 19 février 2007, un brouillard très dense s'est formé, puis développé pour atteindre une hauteur d'environ 300m. Cet épisode a fait l'objet d'une période intensive d'observation et son analyse a posteriori a permis d'illustrer différentes interactions entre les processus dynamiques, microphysiques et radiatifs impliqués dans la formation et l'évolution du brouillard :

- l'augmentation significative du nombre d'aérosols, potentiels noyaux de condensation,
- un taux de refroidissement important (de l'ordre de $-3^\circ/h$) qui pilote l'inversion de température et l'atteinte des conditions de saturation des couches d'air proches du sol,
- la baisse de la visibilité due à l'hydratation des aérosols avant formation,
- l'influence de la distribution de la taille des aérosols sur le cycle de vie du brouillard (Elias et al., 2009),
- l'homogénéisation thermique de la couche de surface par le refroidissement radiatif ($-6^\circ/h$) en haut de la couche de brouillard.

Ce cas présente donc un grand intérêt pour la validation des codes de prévisions météorologiques, et leur sensibilité à la paramétrisation ou modélisation de la microphysique de l'eau, du rayonnement et de la turbulence.

5.3 Validation du couplage dynamique du modèle d'absorption 3-D

Si les résultats sur les profils atmosphériques réalistes semblaient conforter la validité physique de notre modèle, qu'en est-il de son comportement dynamique ? De nombreuses études montrent l'importance de l'utilisation d'un modèle radiatif

FIGURE 5.1 – Liste des instruments déployés durant ParisFog, paramètres pouvant être retrouvés à partir des mesures, gamme mesurée par les instruments et résolution, et type d'opération (RT : opérations de routine ; IOP : période d'observation intensives) ; (Haeffelin et al., 2010)

Category	Instruments	Measured parameters	Range and resolution	Operations
Ground and surface properties	Ground temperature and moisture sensors located at 0, -10, -20, -30, -50 cm	Temperature and water profile in the ground.	RA: 0 to -50 cm RE: 1 min	RT
	Bowen station	Surface energy budget (sensible + latent).	—	RT
Surface layer meteorology	Temperature and humidity sensors located at 1, 2, 5, 10, and 30 m on two 30-m masts located 1 km apart	Temperature and humidity profiles at five levels above ground.	RA: 1–30 m RE: 1 min	RT
	PTUV sensors located at 2 and 10 m (zone 1); 17 and 25 m (zone 2)	Pressure, temperature, humidity, wind speed and direction, and precipitation.	RA: 1–30 m RE: 1 min	RT
	Young and Gill sonic anemometers located at 10 and 30 m on two 30-m masts located 1 km apart	Turbulent kinetic energy, friction velocity u^* .	RA: 10–30 m RE: 10 min	RT
Radiative fluxes	Kipp & Zonen CHI, CM22, and CG4 radiometers (zone 2)	Downwelling shortwave (SW) direct, diffuse, and global + longwave (LW) irradiances.	RA: surface RE: 1 min	RT
	Kipp & Zonen CM21 and CG2 radiometers (zone 1) at 2 and 30 m	Downwelling and upwelling SW and LW global irradiances.	RA: 2–30 m RE: 1 min	RT
Atmospheric profiles	PTUV sondes (Vaisala) attached to a tethered balloon at 50, 70, 90, 110, and 130 m	Pressure, temperature, humidity, wind speed, and direction (50–130 m).	RA: 50–130 m RE: 1 min	IOP
	RS90 radiosondes launched at 0000 and 1200 UTC, 15 km from zone 1	Pressure, temperature, humidity, wind speed, and direction (0–20 km).	RA: 0–20 km RE: 2 day ⁻¹	RT
	RS92 radiosonde launched during IOPs from zone 1	Pressure, temperature, humidity, wind speed, and direction (0–20 km).	RA: 0–20 km RE: 2–6 IOP ⁻¹	IOP
Aerosol and fog optical properties	Degreanne DF320 and DF20+ visibilimeter (490–750 nm, 550 nm peak sensitivity)	Visibility at 4-m height at two locations 1 km apart.	RA: surface RE: 10 s	RT
	Vaisala CT25K ceilometer (905 nm)	Vertical profile of backscatter. Fog and cloud-base height.	RA: 0.1–5 km RE: 1 min	RT
	7l aethalometer	Absorption coefficient	RA: surface RE: 1 min	RT
	TSI 3563 nephelometer	Scattering coefficient (10°–170°) at 450, 550, and 700 nm	RA: surface RE: 1 min	RT
	CIMEL CE-318 sun photometer (440, 670, 870, 1020 nm)	Aerosol optical depth.	RA: column integrated RE: 15 min	RT
Aerosol and fog microphysics	Palas Welas-2000 particle counter	Aerosol and fog particle size distribution in 0.4–10-micron range	RA: 0.4–10 microns RE: 5 min	IOP
	TSI Scanning Mobility Particle Sizer (SMPS) particle counter	Aerosol particle size distribution in 0.01–0.4-micron range	RA: 0.01–0.4 microns RE: 10 min	RT
	GRIMM condensation particle counter (CPC)-5400 particle counter	Aerosol particle counter	RA: 0.01–0.4 microns RE: 1 min	RT
Aerosol chemistry	0.4- and 8-nm filters + spectrometer analysis	Concentration of BC and major ions (sulfates, nitrates, ammonium)	RA: surface RE: 2 IOP ⁻¹	IOP
Ancillary remote sensing	Thales GPS receiver	Column-integrated precipitable water	RA: column RE: 15 min	RT
	Degreanne UHF radar	Vertical profile of wind speed and direction	RA: 500–2000 m RE: 15 min	RT
	95-GHz Doppler radar	Vertical profile of reflectivity and Doppler velocity. Cloud boundaries. Microphysics of ice.	RA: 100 m–15 km RE: 1 min	RT

couplé à la CFD, pour l'étude de la couche limite atmosphérique nocturne. Durant ses travaux de thèse, Dall'Ozzo (2013) a montré l'amélioration considérable des résultats de simulation d'un jet de basse couche avec le couplage radiatif. A l'aide de mesures expérimentales conduites dans le Meteor Crater dans l'Arizona, Hoch et al. (2011) a montré que le refroidissement radiatif pouvait représenter près de 30 % du refroidissement total. Cette étude montre également l'importance du relief sur les taux de refroidissements radiatifs et donc le caractère 3-D des transferts radiatifs sur des terrains complexes.

L'objet de ce chapitre est de tester l'influence du modèle 3-D infrarouge sur la formation et l'évolution d'un cas de brouillard radiatif. Dans un premier temps, nous avons repris le cas « 1-D » de la colonne de cellule périodique en translation. L'advection étant ainsi coupée, l'évolution thermique de la couche atmosphérique étudiée n'est pilotée que par le forçage thermique au sol et le refroidissement radiatif. Sur ce cas, nous avons effectué une étude de sensibilité à différents paramètres numériques. Enfin, sur un domaine avec un bâti idéalisé, nous étudierons les effets radiatifs 3-D captés par la méthode des ordonnées discrètes.

5.3.1 Cas de la colonne périodique en translation : Comparaison des modèles radiatifs 1-D et 3-D

Dans le chapitre 4, nous avons comparé les codes radiatifs 1-D et 3-D sur des profils atmosphériques. Ici, on s'intéresse aux effets dynamiques du couplage de notre modèle radiatif 3-D sur la même colonne de cellule. En choisissant ce cas-là, on coupe les effets de l'advection horizontale. Aussi, n'ayant pas activé le forçage en haut du domaine par le vent géostrophique, l'évolution de nos variables thermiques et radiométriques n'est pilotée que par le forçage au sol et radiatif. Avec une configuration 1-D, nous allons comparer le couplage du modèle radiatif 3-D avec les résultats obtenus en utilisant le modèle 1-D, solution de référence. Ce cas a été décliné en jouant sur la méthode de quadrature utilisée, la fréquence d'appel du module radiatif 3-D et le fichier d'initialisation des grandeurs météorologiques.

Dans une configuration aussi simplifiée, on peut s'interroger sur le caractère significatif des comparaisons entre les grandeurs simulées et observées. L'accord entre les mesures expérimentales et *Code_Saturne* sur le cas du brouillard radiatif ont fait l'objet de l'article de Zhang et al. (2014). Ici, on s'intéresse seulement au modèle radiatif et à sa capacité à reproduire les résultats de la simulation 1-D.

Si nous avons fortement simplifié le cas simulé par Zhang et al. (2014), le forçage des variables au sol par les mesures et le couplage radiatif suffisent à produire de l'eau liquide nuageuse et à développer verticalement la couche de brouillard. La simulation débute à 21h00 avec un état initial défini soit par la simulation de la POI13 par Zhang et al. (2014), soit par les radiosondages. Pour chacune de ces initialisations, nous avons effectué 9h de simulation en faisant varier la méthode d'intégration angulaire dans le modèle 3-D.

Par ailleurs, en vue d'économiser du temps de calcul, nous avons testé la fréquence

de passage dans le module radiatif 3-D. Les 3 fréquences d'appel sont 1/1, 1/10 et 1/60, ce qui signifie que le module radiatif est appelé respectivement toutes les itérations, toutes les 10 itérations ou toutes les 60 itérations. Le pas de temps, égal à 10s, a été choisi de telle sorte que la condition de Courant-Friedrich-Lewy (CFL) ne dépasse pas 1. Ainsi, la fréquence de passage dans le module radiatif est un appel toutes les 10s, toutes les 1min40s ou toutes les 10min.

5.3.1.1 Sensibilité à l'initialisation sur l'évolution du contenu en eau liquide (LWC)

Sur la figure 5.2 est représenté le contenu en eau liquide simulé avec le modèle 1-D et avec une initialisation par les données simulées. Sur la figure 5.3, l'initialisation a été faite avec les radiosondages (données observées durant la POI13). Les résultats tracés sur les figures 5.4 et 5.5 ont été obtenus avec le modèle radiatif 3-D, appelé toutes les itérations et utilisant la quadrature LC_{15} .

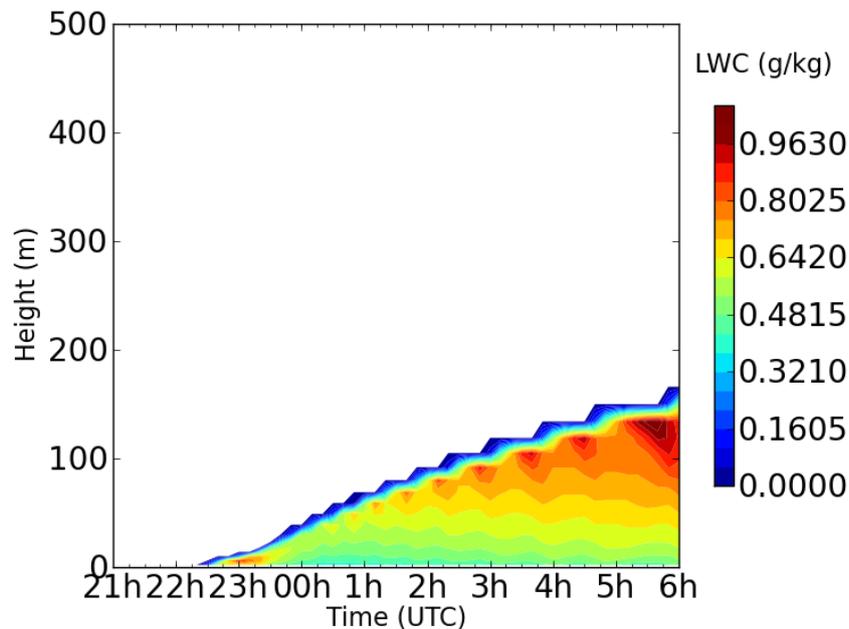


FIGURE 5.2 – Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données simulées, modèle radiatif 1-D

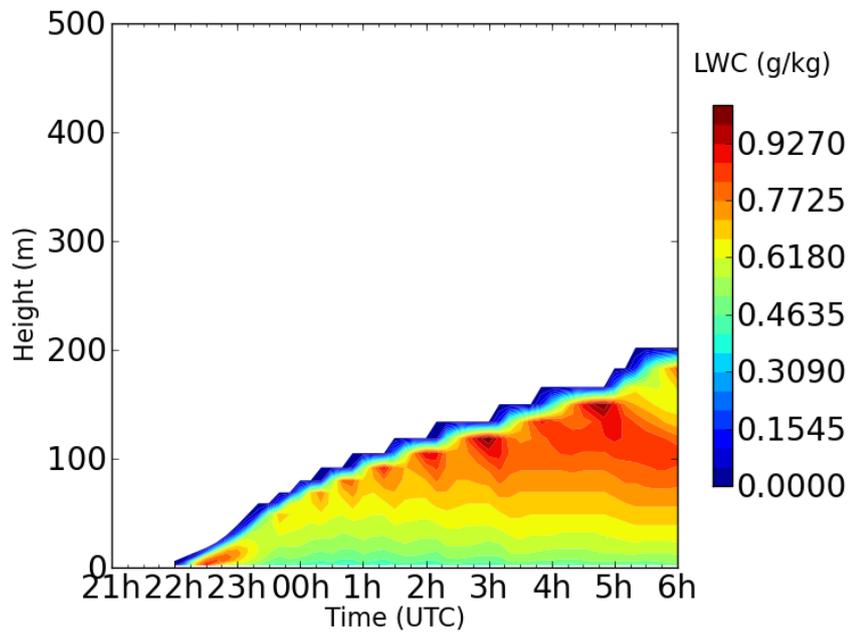


FIGURE 5.3 – Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données observées, modèle radiatif 1-D

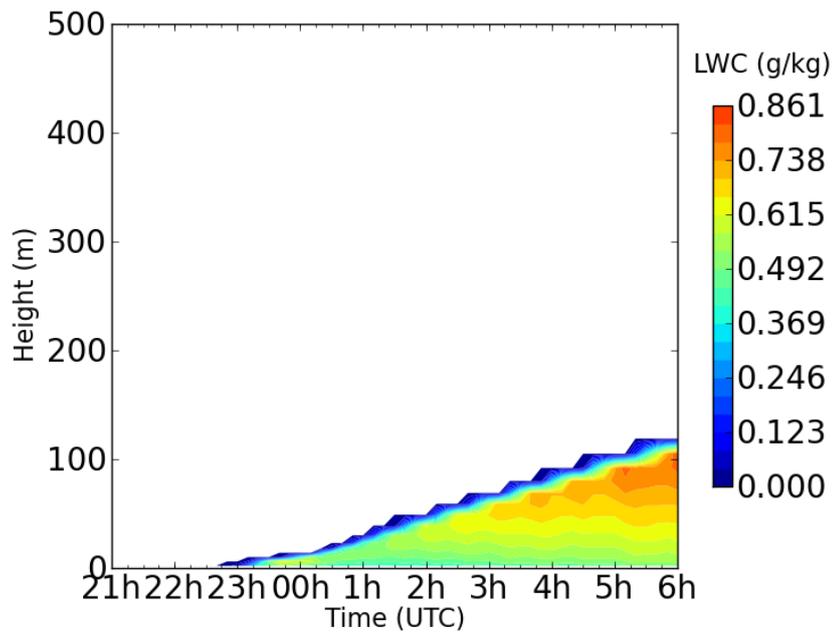


FIGURE 5.4 – Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données simulées, modèle radiatif 3-D, quadrature LC_{15} : 120 directions

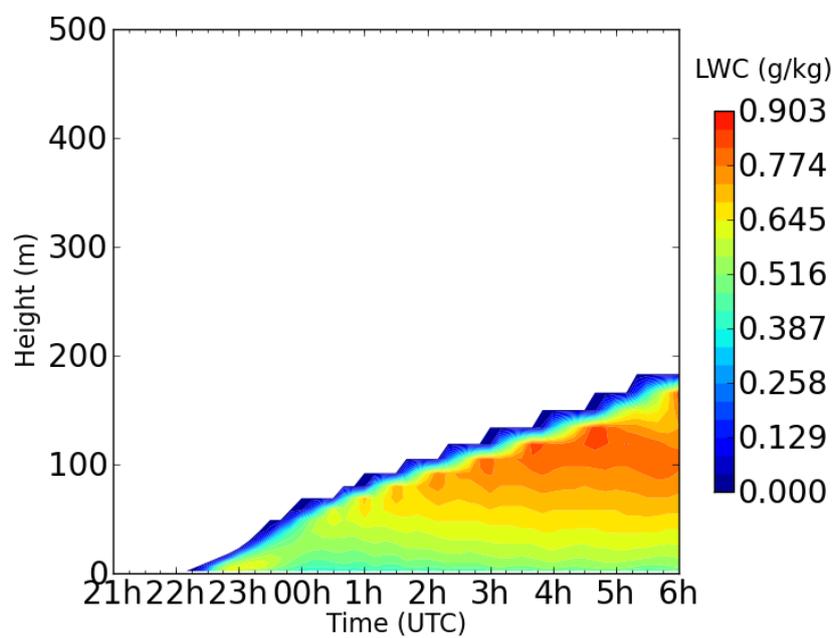


FIGURE 5.5 – Évolution du contenu en eau liquide, fichier météo : données observées, modèle radiatif 3-D, quadrature LC_{15} : 120 directions

Sur les contenus en eau liquide tracés sur les figures 5.4 et 5.5, on constate que le module radiatif 3-D produit de l'eau liquide nuageuse. Ceci permet d'ores et déjà d'acter la vérification de la bonne implémentation du code radiatif 3-D développé et son couplage dynamique à la CFD et la thermodynamique du module atmosphérique de *Code_Saturne*.

Concernant l'influence du fichier météo d'initialisation, on remarque que le brouillard apparaît vers 22h20 (figure 5.4) lorsqu'on utilise les données simulées pour entamer la simulation 1-D tandis qu'il apparaît à 22h (figure 5.5) avec l'initialisation par les radiosondages. Sur le tableau 5.1 représentant les différences entre les deux fichiers d'initialisation, le contenu en vapeur d'eau est supérieur dans le cas des observations. Les conditions de saturation sont plus rapidement atteintes avec les conditions initiales définies par les radiosondages, ce qui explique donc l'heure précoce d'apparition du brouillard. Cet effet est également observable sur les résultats de simulation produits par le couplage du modèle radiatif 3-D, où l'initialisation par les radiosondages avance l'heure d'apparition du brouillard d'environ 20min.

TABLE 5.1 – Différences entre les fichiers météorologiques utilisés pour l'initialisation des simulations

Altitude (m)	données simulées		données observées	
	T ($^{\circ}C$)	q_v (g/kg)	T ($^{\circ}C$)	q_v (g/kg)
1	5.2690	5.251652	5.4230	5.251652
2	5.9150	5.430013	6.5500	5.6800
10	7.1900	5.66807	7.2500	6.3100
30	7.2900	5.827801	7.4500	6.3900
54	7.5982	6.322257	7.5982	6.4000
91	7.9500	6.400	7.9500	6.39130

Si l'initialisation influence l'heure d'apparition de l'eau liquide nuageuse, elle va également influencer l'évolution de la hauteur du brouillard. En se formant plus tôt, on peut s'attendre à ce que la hauteur atteinte en fin de simulation soit plus grande. Dans le cas du modèle radiatif 1-D, celle-ci atteint environ 160 mètres (figure 5.2) contre 200 mètres (figure 5.3). Il en est de même pour le modèle radiatif 3-D où la couche de brouillard atteint une altitude de 150 mètres contre 200 mètres.

Enfin en comparant les figures 5.3 et 5.5, ou les figures 5.2 et 5.4, on peut se demander pourquoi pour le modèle 3-D le brouillard n'atteint pas une altitude plus grande sachant qu'il se forme 10min avant le modèle 1-D dans les deux configurations d'initialisation. Une explication possible réside dans le fait qu'en présence d'eau liquide nuageuse, le modèle 1-D refroidit plus que le modèle 3-D. Les comparaisons sur les profils du taux de réchauffement vont permettre d'infirmer ou de confirmer cette conjecture.

5.3.1.2 Comparaison de l'évolution des profils du taux de réchauffement

À 21h, les profils du taux de refroidissement des deux modèles radiatifs (figure 5.6 et 5.7) sont très proches. En revanche, une fois que l'eau liquide nuageuse s'est

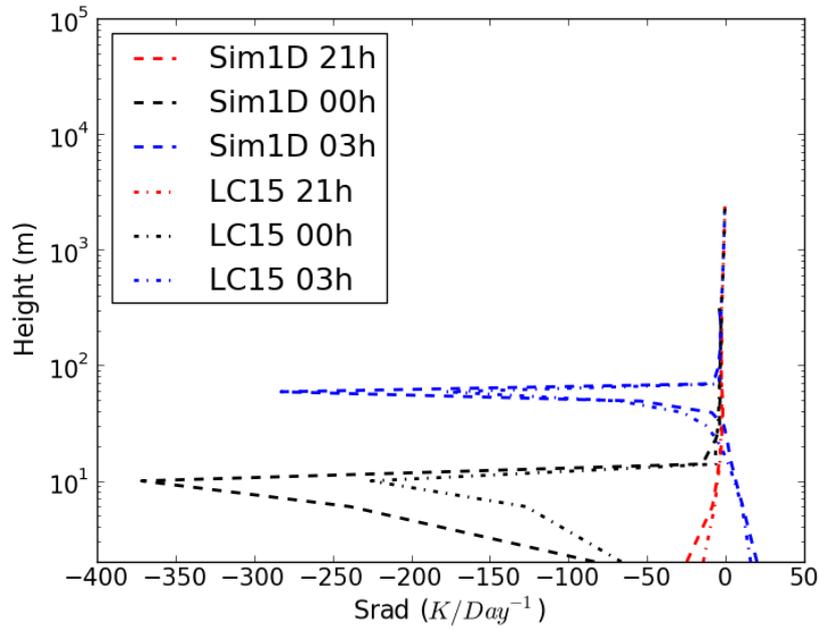


FIGURE 5.6 – Évolution des profils du taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données simulées

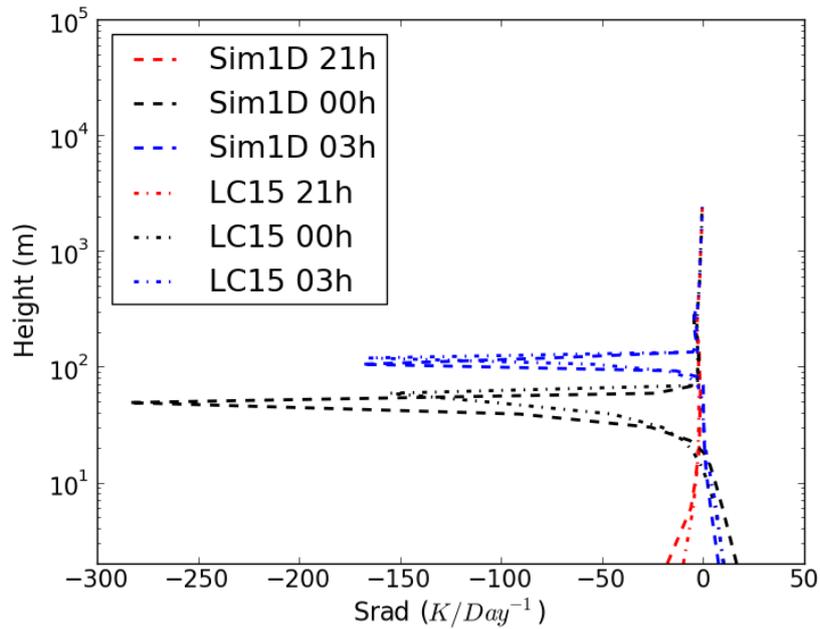


FIGURE 5.7 – Évolution des profils du taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données observées

formée, le taux de refroidissement en haut de la couche de brouillard est significativement plus grand pour le modèle 1-D.

5.3.1.3 Comparaison de l'évolution des profils de température

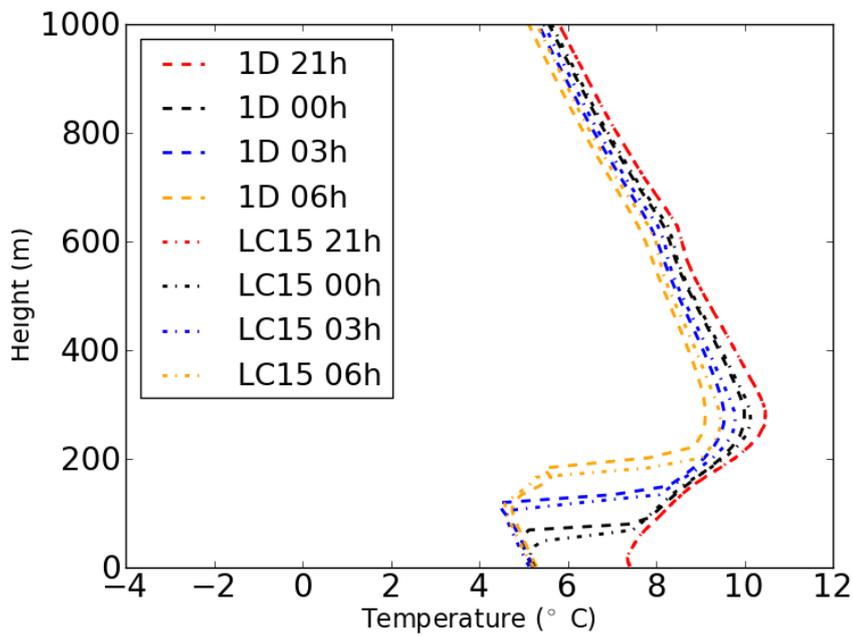


FIGURE 5.8 – Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données simulées

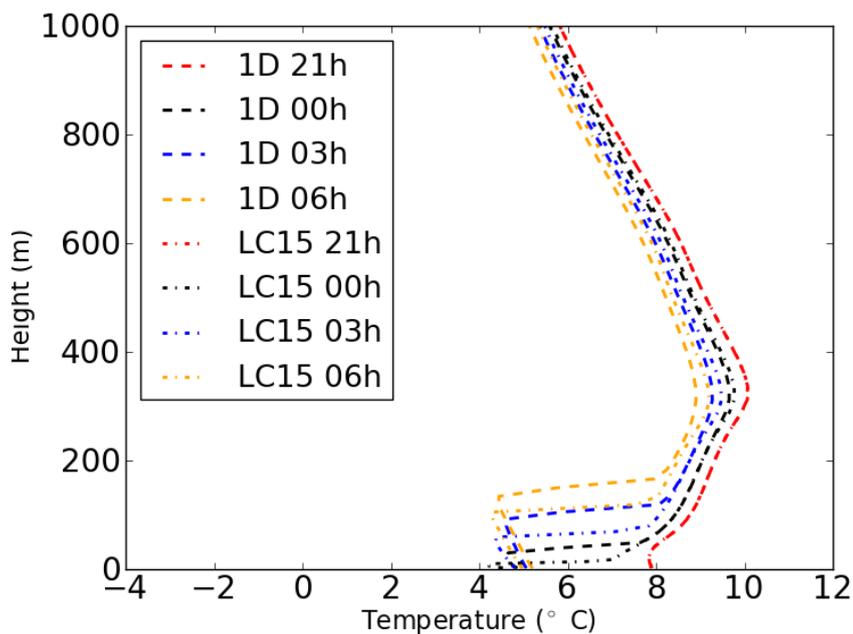


FIGURE 5.9 – Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions, fichier météo : données observées

Les figures 5.8 et 5.9 représentent l'évolution de la température de la colonne de cellules sous l'effet du forçage au sol par les mesures et l'effet du rayonnement infrarouge. Dans le cas de l'initialisation par les données simulées, les profils de température simulés par le modèle radiatif 3-D sont extrêmement proches du modèle 1-D. La paramétrisation grise de l'absorption infrarouge à l'aide des fonctions d'émissivités de Sasamori (1968) est capable de reproduire les résultats de simulation du modèle 1-D.

Pour les deux types d'initialisation, on remarque le changement de signe du gradient vertical de température, correspondant au haut de la couche de brouillard, se produit à des altitudes plus faibles pour le modèle 3-D. Le développement vertical du brouillard concède donc un retard par rapport au modèle 1-D.

5.3.2 Sensibilité à la méthode de quadrature

Que ce soit pour les applications liées à la combustion ou celles liées à l'atmosphère, la quadrature LC_{15} de Lebedev (1976) se distinguait positivement sur les cas simulés du chapitre 2 et 4. Cette quadrature utilise 120 directions de propagation discrètes ce qui est deux fois et demi le nombre de directions utilisées par la quadrature S_6 . Dans un contexte industriel, le coût calcul doit être minimisé autant que possible. Sur la configuration colonne, nous avons donc testé les différentes quadratures initialement présentes dans *Code_Saturne* (32 et 128 directions) et celles ajoutées durant nos travaux (48,60 et 120). Nous allons donc présenter les résultats de simulation obtenus avec les deux modèles radiatifs 1-D et 3-D, avec une initialisation par les données simulées.

5.3.2.1 Évolution du contenu en eau liquide

Une première remarque est que l'ensemble des quadratures permettent la formation d'eau liquide nuageuse. La seconde remarque est que l'évolution qualitative de la couche de brouillard simulée par le code 3-D et 1-D sont très similaires. Sur les figures 5.10, nous allons nous attarder sur 3 critères :

- l'heure d'apparition de l'eau liquide nuageuse
- l'altitude atteinte par le sommet de la couche de brouillard à la fin de la simulation
- la concentration maximale d'eau liquide atteinte dans la couche de brouillard

Concernant l'heure d'apparition du brouillard, le modèle 1-D forme les premières gouttelettes de nuages à 22h20. La quadrature T_2 du modèle 3-D forme le brouillard légèrement avant (22h10) tandis que toutes les autres quadratures le forment légèrement après. Compte tenu que les simulations sont initialisées de manière identique, la quadrature T_2 refroidit donc les couches d'air proche du sol plus vite que le modèle 1-D. A l'inverse, les autres quadratures refroidissent moins vite que le modèle 1-D.

L'altitude atteinte par le sommet de la couche de brouillard formé par le modèle 1-D est d'environ 160 mètres. Toutes les quadratures forment un brouillard dont le sommet ne dépasse pas 150 mètres. Cette altitude maximale du modèle 3-D est produite par la quadrature T_2 . En formant de l'eau liquide plus rapidement que le modèle 1-D, on pourrait penser que le développement vertical du brouillard par le

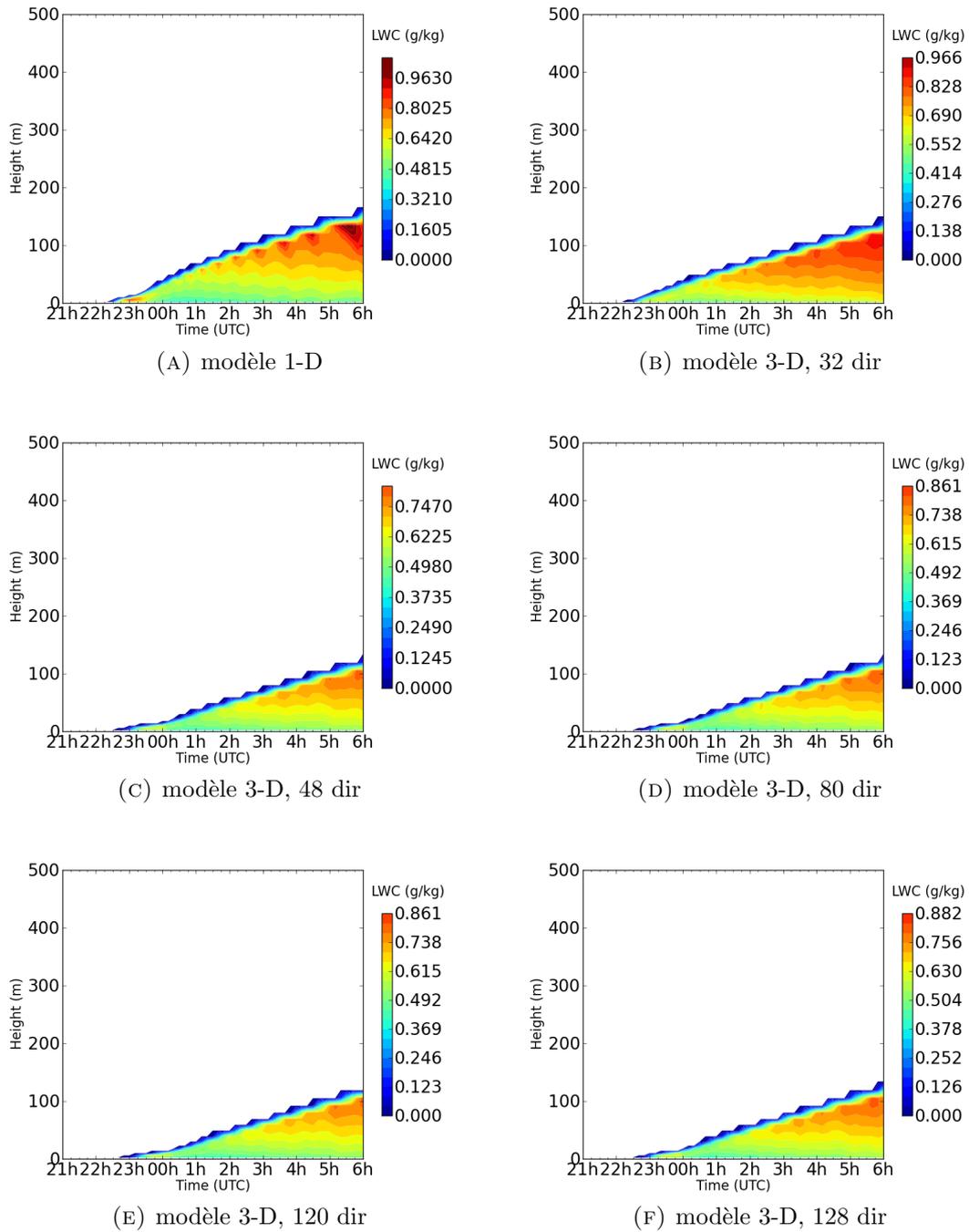


FIGURE 5.10 – Évolution du contenu en eau liquide (LWC) simulé par le modèle 1-D et 3-D pour différentes méthodes de quadrature : S_6 , S_8 , LC_{15} , T_4

modèle radiatif 3-D utilisant T_2 sera plus rapide et que l'altitude maximale atteinte sera plus importante, mais ce n'est pas ce que nous observons. En regardant ce qui se passe entre la formation du brouillard et minuit, la formation d'eau liquide est beaucoup plus faible dans le modèle 3-D que dans le modèle 1-D. Cette différence ne peut pas s'expliquer par le fait que le modèle 3-D refroidit moins les couches d'air en contact avec le sommet de la couche de brouillard. La conjecture que nous avons émise, quant au fait que le modèle 3-D refroidit moins que le modèle 1-D en présence d'eau liquide, se trouve donc confortée par les simulations de l'évolution de l'eau liquide dans notre colonne.

5.3.2.2 Profils du taux de refroidissement

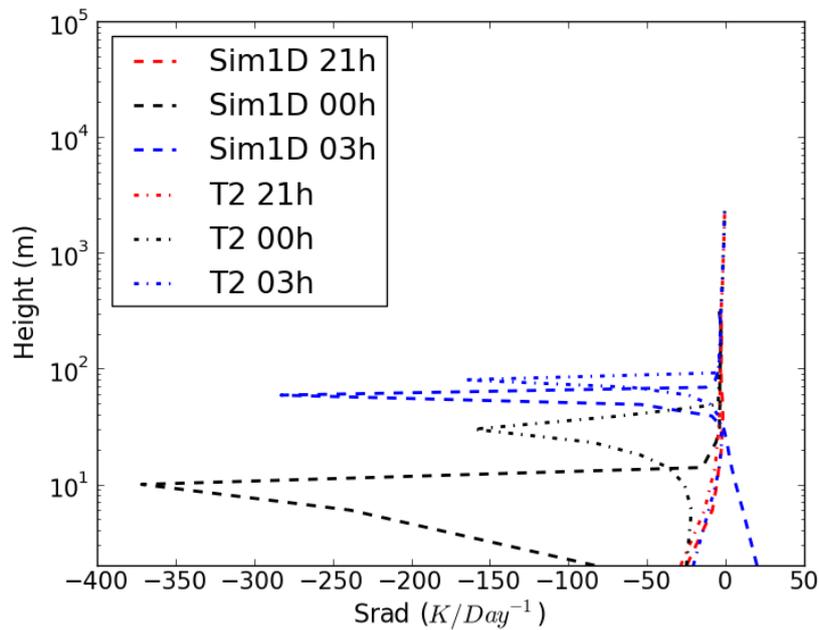


FIGURE 5.11 – Évolution des profils de taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature T_2 : 32 directions, fichier météo : données simulées

Sur la figure 5.11, les profils du taux de réchauffement à 21h, 00h et 03h, produits par le modèle 1-D et 3-D utilisant les données simulées comme initialisation ont été tracés. À l'aide de l'évolution de l'eau liquide nuageuse sur les figures 5.10a et 5.11, nous avons constaté que la quadrature T_2 refroidissait plus que le modèle 1-D en ciel clair, ce qui avait pour conséquence d'atteindre les conditions de saturation plus rapidement. En revanche, la croissance plus lente de la couche de brouillard pour la quadrature T_2 confirmait notre conjecture.

Les figures 5.12 comparent également les profils de taux de réchauffement entre le modèle 1-D et le modèle 3-D pour les autres quadratures. Ces quatre figures confirment une fois de plus que le modèle radiatif 3-D refroidit moins que le modèle 1-D.

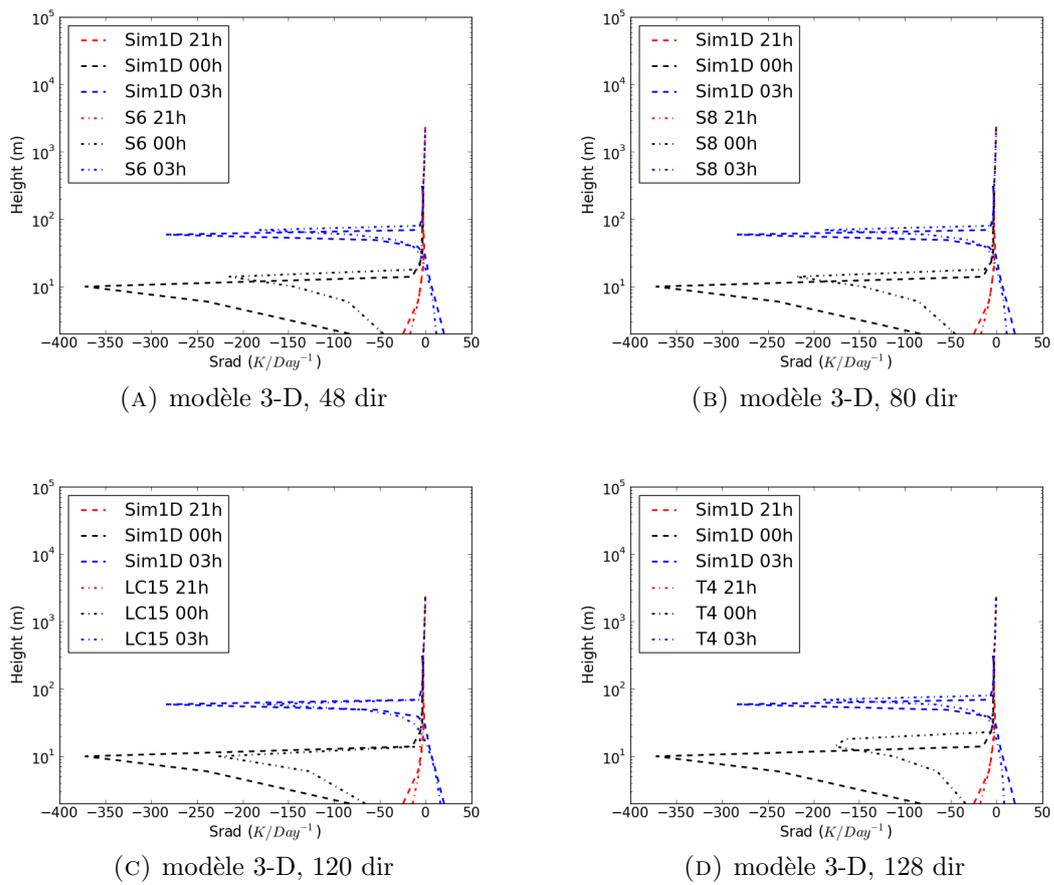


FIGURE 5.12 – Évolution des profils de taux de réchauffement simulés par le modèle 1-D et 3-D pour différentes méthodes de quadrature

5.3.3 Sensibilité à la fréquence d'appel du module radiatif

Si une économie importante peut être faite sur le nombre de directions de propagation discrètes pour la résolution des transferts radiatifs par la méthode des ordonnées discrètes, un paramètre important dans le coût calcul des simulations est la fréquence de passage dans le module radiatif. Sur ce cas colonne, le pas de temps utilisé pour l'intégration temporelle des équations de la mécanique des fluides et de la thermodynamique est de 10 secondes. Ce pas de temps est conditionné par la résolution du maillage, elle-même conditionnée par la physique du problème. Dans notre cas, la fréquence de passage dans le module radiatif est un appel toutes les 10 secondes, toutes les 1 minute et 40 secondes ou toutes les 10 minutes. La problématique est de savoir dans quelle mesure la physique des résultats se dégrade avec la diminution de la fréquence d'appel.

5.3.3.1 Évolution du contenu en eau liquide

La figure 5.13a représente l'évolution du contenu spécifique d'eau liquide nuageuse produite par le modèle 1-D tandis que les figures 5.13b, 5.13c et 5.13d représentent les résultats obtenus avec le modèle 3-D utilisant la quadrature LC_{15} pour les différentes fréquences de passage dans le module radiatif 3-D.

L'évolution du contenu en eau liquide ne diffère que très légèrement entre les résultats du modèle 3-D pour des fréquences de passage de 1/1 ou 1/10. Cela signifie qu'une itération de rayonnement toutes les 10 secondes ou toutes les 1 minutes et 40 secondes ne modifie pas significativement les processus physiques contribuant directement ou indirectement à la formation d'eau liquide nuageuse. Que ce soit pour l'altitude maximale atteinte ou pour l'évolution du contenu en eau liquide, les résultats sont extrêmement proches. En revanche, pour un passage dans le module radiatif toutes les 60 itérations (figure 5.13), le développement vertical de la couche de brouillard est ralenti. Celui-ci n'a atteint qu'une vingtaine de mètres peu après 1h du matin alors que pour les deux autres fréquences d'appel, il a déjà atteint 30 mètres.

5.3.3.2 Évolution des profils de température

Les figures 5.14a, 5.14c et 5.14e représentent les profils de température simulés par le modèle 3-D initialisé par les observations pour les différentes fréquences d'appel du module de rayonnement 3-D. Les résultats obtenus avec l'initialisation par les données simulées sont tracés sur les figures 5.14b, 5.14d et 5.14f. De plus, on a tracé sur chaque figure, le profil de température obtenu avec le code radiatif 1-D.

L'évolution des profils de température confirment que la perte d'information générée par une fréquence d'appel de 1/60 dégrade les résultats. Si l'on regarde les figures 5.14d et 5.14f, on remarque une différence assez importante sur les températures à 00h et 03h. L'inversion du gradient de température en haut de la couche de brouillard ne se retrouve pas aux mêmes altitudes. L'évolution de la température dans la couche limite atmosphérique étant pilotée directement par les échanges radiatifs. On peut donc affirmer qu'il existe une fréquence d'appel critique, dépendant

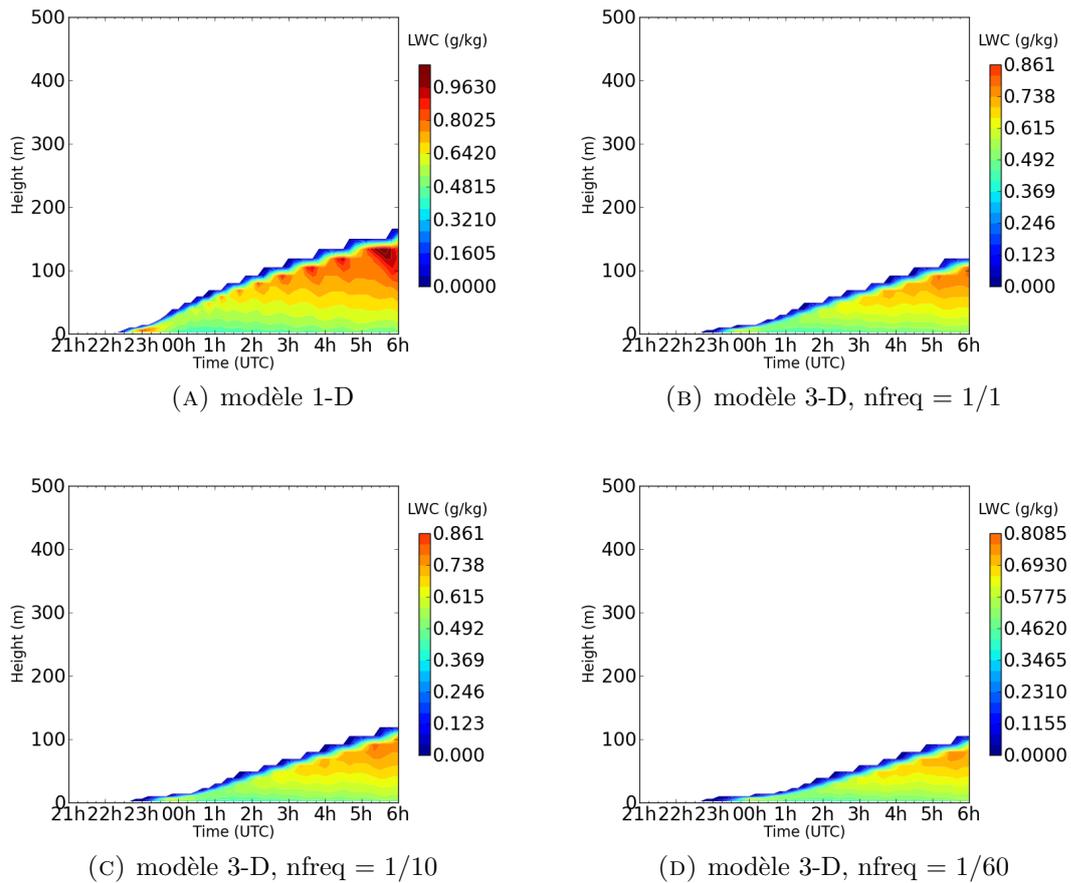
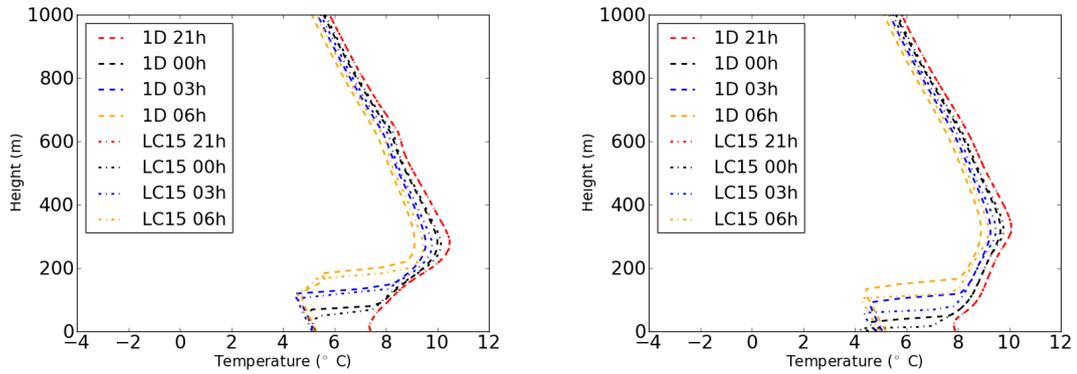
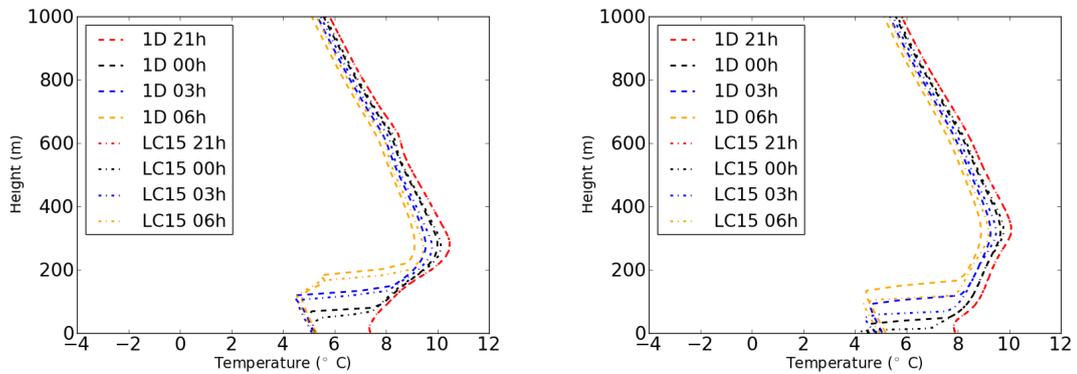
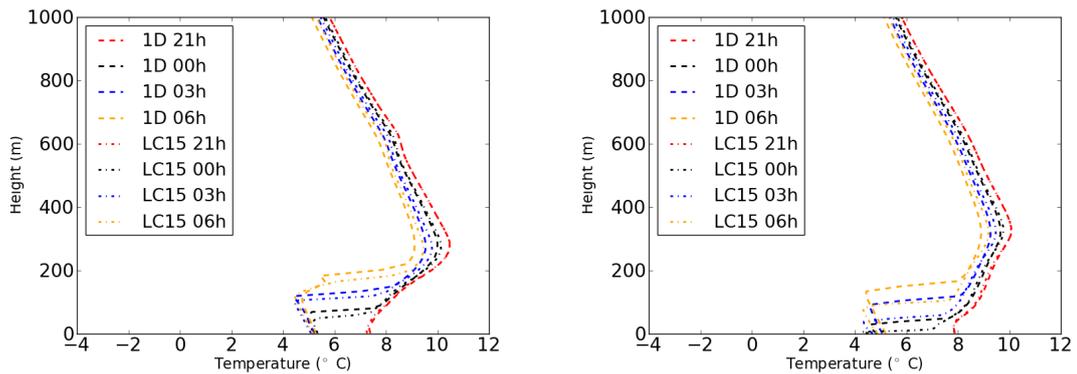


FIGURE 5.13 – Évolution du contenu en eau liquide (LWC) simulé par le modèle 1-D et 3-D avec un passage dans le module radiatif (a) toutes les itérations, (b) toutes les 10 itérations, (c) toutes les 60 itérations ; quadrature LC15 pour une initialisation avec les données simulées

(A) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/1$ (B) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/1$ (C) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/10$ (D) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/10$ (E) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/60$ (F) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/60$ FIGURE 5.14 – Évolution des profils de température simulés par le modèle 1-D et le modèle 3-D quadrature LC_{15} : 120 directions avec $nfreq = 1/1, 1/10$ et $1/60$

du pas de temps et correspondant à un temps physique, à partir de laquelle la physique est modifiée. Cette affirmation est confirmée par l'évolution de la température à 30 mètres, représentée ci-après.

5.3.3.3 Évolution de la température à 30 mètres

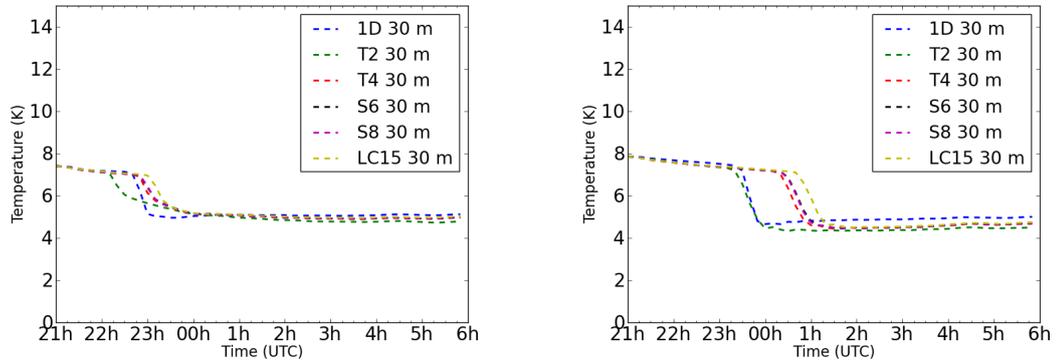
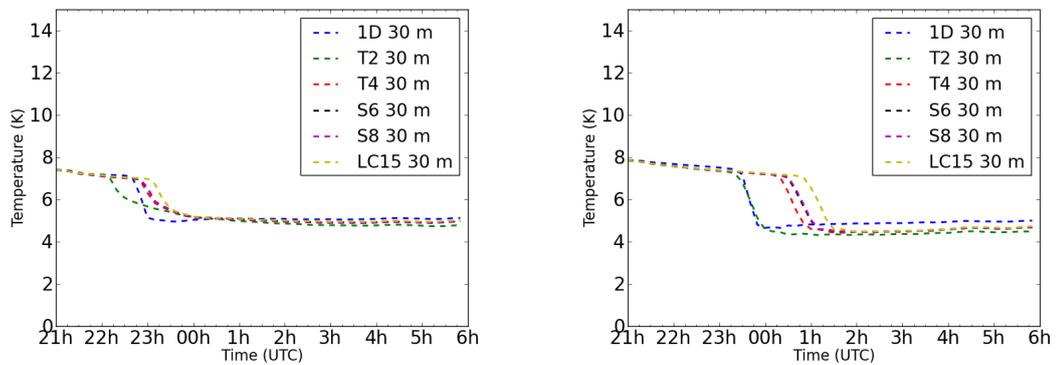
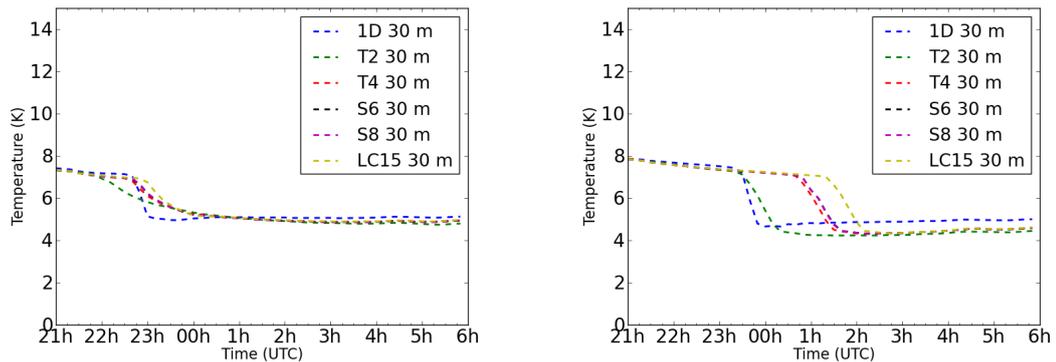
Les figures 5.15a, 5.15c et 5.15e représentent l'évolution de la température à 30 mètres, simulée par le modèle 3-D et initialisée par les observations avec des fréquences de passage dans le code de rayonnement égales à 1/1, 1/10 et 1/60, pour différentes méthodes de quadrature. Les résultats obtenus avec l'initialisation par les données simulées sont tracés sur les figures 5.15b, 5.15d et 5.15f. La solution tracée en bleu sur ces figures représente la température simulée par le modèle 1-D.

En s'intéressant aux figures 5.15d et 5.15f et aux résultats produits par la quadrature LC_{15} , on illustre l'affirmation faite au paragraphe 5.3.3.1, à propos de la fréquence d'appel du module radiatif 3-D, quant au ralentissement du développement vertical du brouillard radiatif. L'évolution de la température à 30 mètres, permet de déterminer l'heure à laquelle l'eau liquide atteint cette altitude. En effet, le fort refroidissement en haut de la couche va générer de la convection verticale de la base de la couche de brouillard (plus chaude car moins refroidie) vers le sommet (maximum du refroidissement infrarouge) permettant aux couches d'air d'atteindre la saturation et de produire de l'eau liquide. La chute de la température à 30 mètres s'arrête dès lors qu'on a formé une couche d'eau liquide au-dessus de cette altitude qui va, elle aussi, refroidir les couches supérieures.

Le ralentissement de ce développement vertical s'observe sur la figure 5.15f en regardant soit l'heure de début, soit l'heure de fin de la chute de la température, plus tardive que pour des fréquences d'appel de 1/1 ou 1/10 (figures 5.15b et 5.15d).

Cette perte d'information est caractérisée également par la pente de la chute de température. Pour la quadrature T_2 , on remarque que la pente est beaucoup moins marquée sur la figure 5.15e que sur la figure 5.15c ou 5.15c. Pendant la durée ou les sorties du modèle radiatif 3-D sont supposées constantes, la production d'eau liquide est liée à un taux de refroidissement constant pendant 6 minutes. Durant ce laps de temps, l'eau liquide se forme en quantité plus faible et refroidit donc moins le sommet de la couche de brouillard. Ce défaut en eau liquide se propage ainsi tout au long de l'évolution expliquant que le retard au début de la chute de température augmente à la fin de cette chute. C'est donc cette propagation dynamique de la perte d'information physique qui propage le retard mais qui l'augmente au cours de l'évolution. Ceci explique donc pourquoi cette chute est moins brutale pour une fréquence d'appel de 1/60.

L'étude présentée dans la sous-section 5.3.1 a été réalisée sur un cas où le modèle 1-D n'est pas limité dans ses capacités à produire une solution respectant la physique du problème. Par la mise en place d'une périodicité de translation en x et y on assure que notre atmosphère sera plan-parallèle infini. Sur ce cas, nous avons montré que les sorties du modèle 3-D étaient capable de reproduire la physique 1-D de l'évolution

(A) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/1$ (B) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/1$ (C) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/10$ (D) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/10$ (E) fichier météo : données observées, $nfreq = 1/60$ (F) fichier météo : données simulées, $nfreq = 1/60$ FIGURE 5.15 – Évolution de la température simulée à 30m par le modèle 1-D et le modèle 3-D pour les deux types d'initialisation avec $nfreq = 1/1$, $1/10$ et $1/60$

d'un brouillard radiatif. Une étude de sensibilité au fichier météorologique utilisé pour l'initialisation, aux types de quadratures ainsi qu'à la fréquence de passage dans le module radiatif a permis de comprendre l'influence de ces paramètres numériques sur l'heure de formation et l'évolution de la hauteur et du contenu en eau liquide du brouillard.

5.4 Cas d'étude avec bâtiments

Les simulations numériques ont été jusqu'alors effectuées afin de s'assurer que le modèle 3-D produisait des solutions équivalentes au modèle 1-D. Pour ce faire, nous avons donc mis en place des cas où la physique du problème était unidimensionnelle. Afin d'illustrer les potentialités du modèle d'absorption développé au cours de ces travaux, il est intéressant de simuler un cas contenant des effets radiatifs 3-D. Dès lors qu'on se place en milieu bâti ou en terrain complexe, le caractère 3-D des transferts radiatifs devient un facteur limitant pour le modèle 1-D. En plaçant des bâtiments dans notre domaine, nous avons donc créé une hétérogénéité horizontale dans le domaine.

La simulation du cas de brouillard a nécessité un véritable chantier informatique dans le code de rayonnement. Nous avons fait le choix de ne pas aborder la problématique de l'implantation informatique de notre modèle d'absorption au sein du code 3-D. Toutefois la difficulté la plus importante à laquelle nous avons été confrontés est l'incompatibilité informatique du module atmosphérique avec les transferts radiatifs 3-D. Dans le chapitre 1 nous avons présenté la résolution grise de l'ETR par la méthode des ordonnées discrètes, utilisée pour les applications du type combustion, sûreté incendie et arc électrique. L'utilisation de cette physique particulière impose que le scalaire thermique transportée dans l'équation de continuité de l'énergie soit la température ou l'enthalpie. Par ailleurs, l'activation du module atmosphérique impose que le scalaire thermique soit la température potentielle. Les travaux d'intégration informatique dans *Code_Saturne* et de pérennisation de l'outil nécessiteront donc la création d'un nouveau modèle de rayonnement 3-D dédié aux applications atmosphériques, afin de préserver la structure du code.

5.4.1 Paramètres de la simulation

5.4.1.1 Construction du maillage

Le maillage utilisé pour les simulations a été construit à l'aide de la plateforme numérique Salomé (CEA/DEN et al., 2015). Bresson (2014) a développé un code Python s'appuyant sur le noyau de Salomé afin d'élaborer automatiquement des maillages robustes pour la modélisation atmosphérique en terrain complexe et en milieu bâti. La modélisation des phénomènes atmosphériques contraint fortement le maillage. Afin d'éviter les non-conformités et de contrôler facilement la qualité du maillage, Bresson (2014) a mis au point une méthode pour construire un maillage 2-D non structuré au sol offrant à l'utilisateur de nombreux paramètres permettant de raffiner autour des bâtiments. Le maillage 3-D est obtenu par extrusion sur la

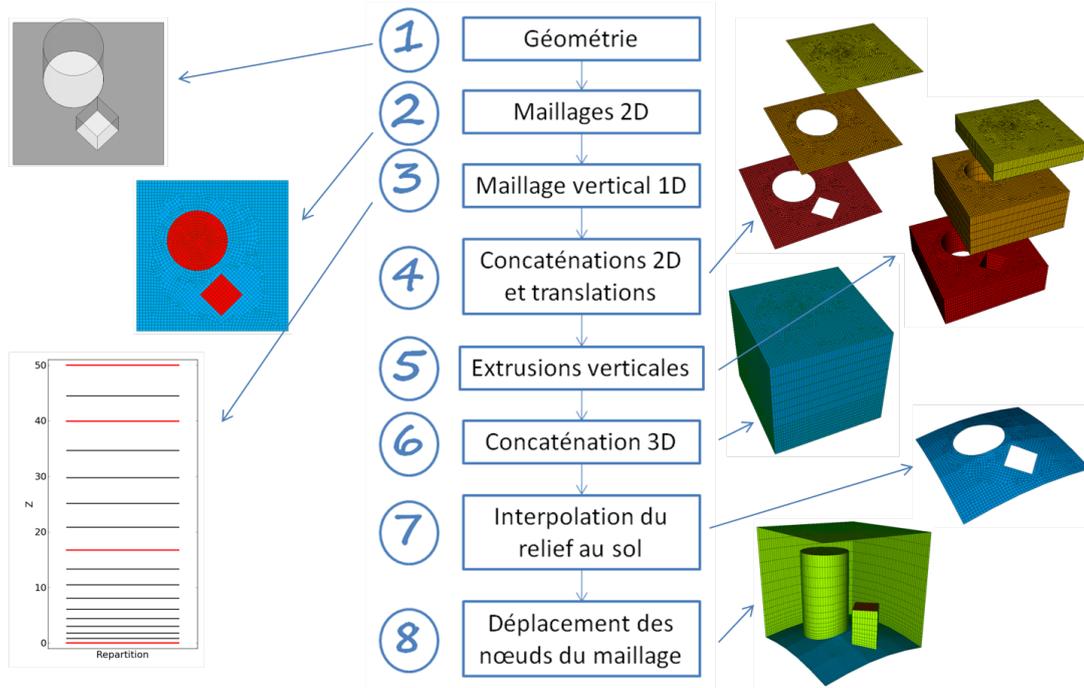


FIGURE 5.16 – Méthode de construction des maillages en terrain complexe et milieu bâti (Bresson, 2014)

verticale, donc la discrétisation est aussi gérée par l'utilisateur via différents paramètres. La construction est décomposée en 8 étapes présentées sur l'image ?? :

Cet outil se veut ergonomique pour un usage simple (terrain plat avec bâti idéalisé) et riche en fonctionnalités pour un usage avancé. Voici un exemple de maillage complexe réalisé à l'aide de cet outil :

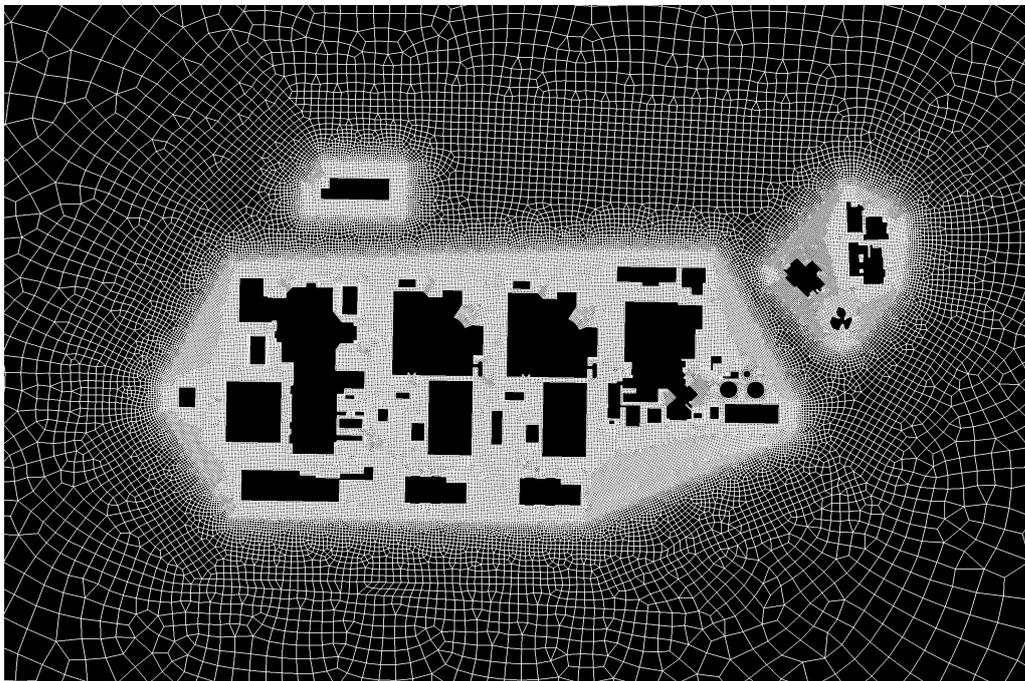


FIGURE 5.17 – Maillage d'un site industriel (Bresson 2013)

Afin d'explorer les potentialités du modèle radiatif 3-D, nous avons construit un maillage de dimension $890\text{m} \times 890\text{m} \times 1000\text{m}$, contenant 3 bâtiments parallélépipédiques sur terrain plat représenté ci-dessous :

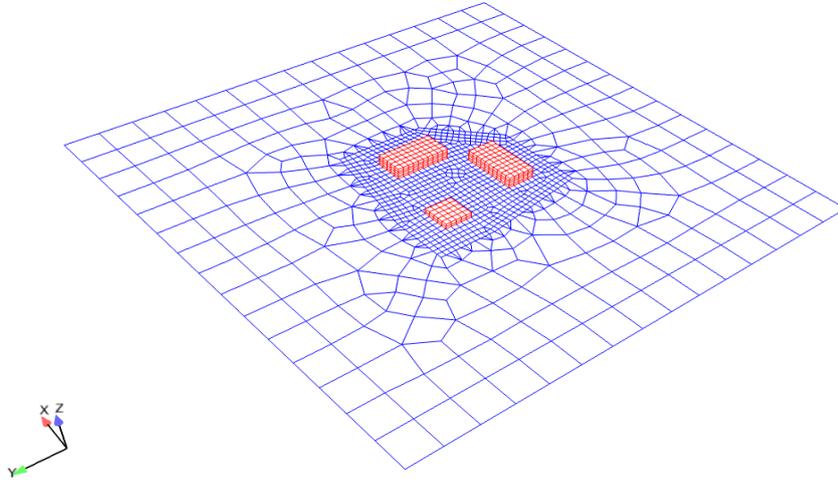


FIGURE 5.18 – Maillage en milieu bâti idéalisé

5.4.2 Les conditions aux limites radiatives

La première simulation exploratoire du cas de brouillard radiatif utilisant le code 3-D de rayonnement doit permettre d'étudier le comportement des grandeurs radiométriques avec présence ou non d'eau liquide et de souligner les différents effets radiatifs 3-D potentiellement capturés par notre modèle. Néanmoins, la question des conditions aux limites radiatives pose un problème. En effet, pour les intercomparaisons de code effectuées dans le chapitre 4, imposer des conditions périodiques via un recollement de maillage permettait de s'affranchir des effets de bords radiatifs. Sur le cas dynamique 1-D présenté à la sous-section 5.3.1 ce fut également le cas. Or, imposer des conditions périodiques sur l'ETR via la méthode des halo, contraint également les conditions aux limites pour le fluide à être périodiques. Quelle que soit la direction du vent choisie comme condition initiale, ce vent, à travers le domaine, va être fortement ralenti par la présence des bâtiments puis, en raison de la périodicité, entrer à nouveau dans le domaine et ce, jusqu'à la fin de la simulation. Les champs de vent simulés ainsi que les grandeurs turbulentes ne seront pas représentatifs du cas de la POI13.

Une manière de traiter le problème est d'imposer les observations comme conditions aux limites quand elles sont disponibles ou dans le cas contraire, les résultats de simulation du modèle 1-D. Les conditions de type Dirichlet, pour les différents scalaires et vecteurs transportés tels que la vitesse du vent, la température et le contenu en eau liquide, sont physiquement adéquates. En revanche du point de vue radiatif, on peut se demander quelles valeurs imposer pour la luminance aux différentes faces des bords latéraux afin de fermer l'ETR résolue par le solveur 3-D.

5.4.3 Description qualitative de l'évolution du brouillard

Peu après le coucher du soleil, le sol se refroidit en émettant du rayonnement infrarouge. Les couches d'air en contact avec le sol vont, elles aussi, se refroidir. Le sol va ainsi atteindre une température inférieure à celles des couches d'air et conduire à une inversion du gradient de température et la formation de la couche stable qui va se développer verticalement grâce à la turbulence, permettant l'homogénéisation verticale entre les couches froides et chaudes. Les premières gouttelettes de nuages vont se former dès que les conditions de saturation sont atteintes.

Sur les figures 5.19, on a représenté le champ 3-D d'eau liquide dans le domaine à différents instants de la simulation. Le brouillard s'est formé à la limite $x = x_{\max}$ et a été advecté dans le domaine par le vent (figure 5.19d). La présence des bâtiments génère des hétérogénéités horizontales (figures 5.19d, 5.19e, 5.19f, 5.19g, 5.19h, 5.19i, 5.19j, 5.19k et 5.19l). Si le brouillard est advecté dans le domaine, c'est qu'il s'est formé aux limites du domaine et non à l'intérieur. Les valeurs des variables météorologiques au bord du domaine sont imposées par les valeurs simulées par la simulation du cas 1-D. Celui-ci forme de l'eau liquide avant que l'air à l'intérieur du domaine 3-D n'ait atteint les conditions de saturation. Si les effets radiatifs sur la dynamique du brouillard se trouvent être parasités par l'advection, ce cas va néanmoins nous permettre d'identifier les effets radiatifs 3-D captés par notre modèle.

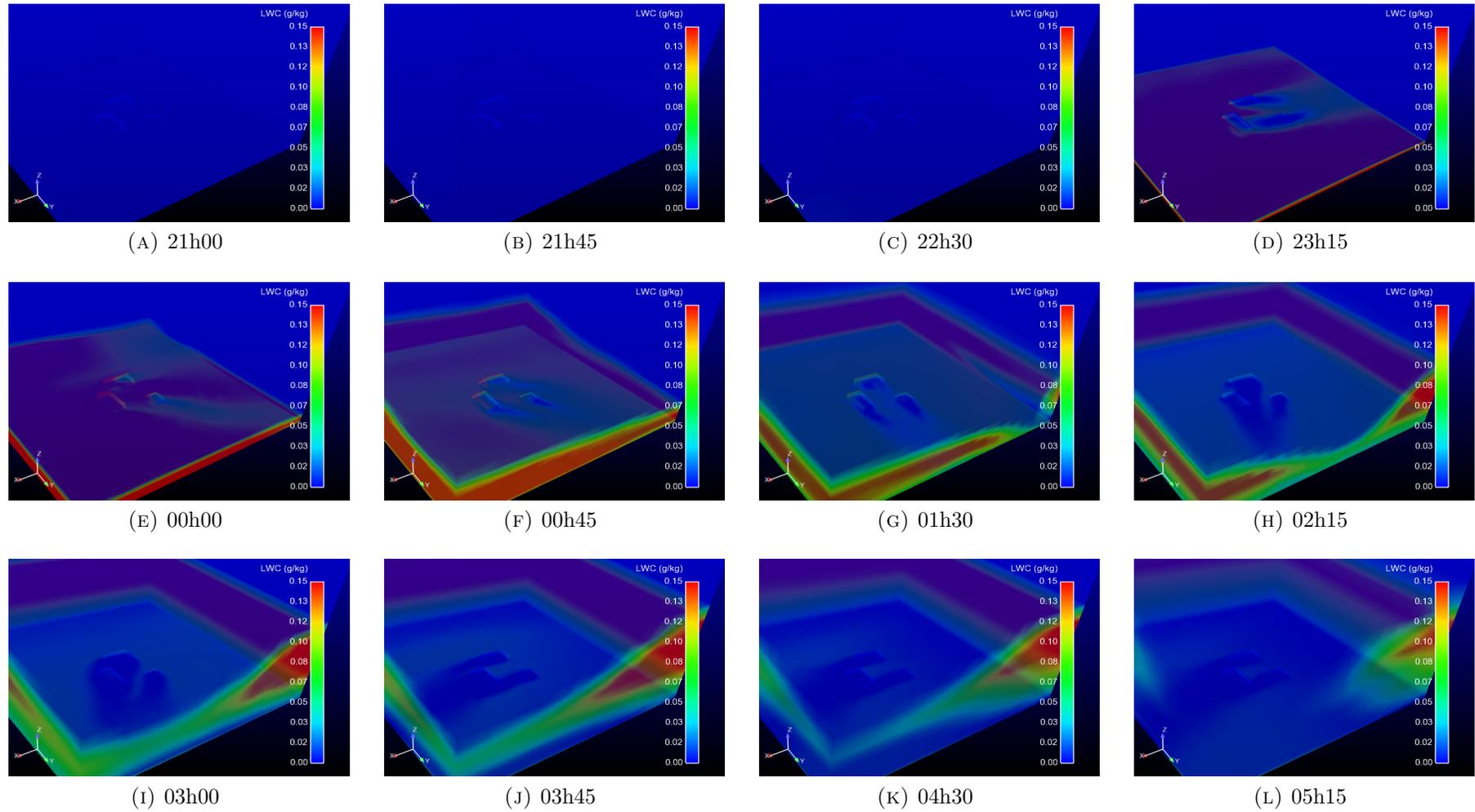


FIGURE 5.19 – Évolution du champ 3-D d'eau liquide dans le domaine

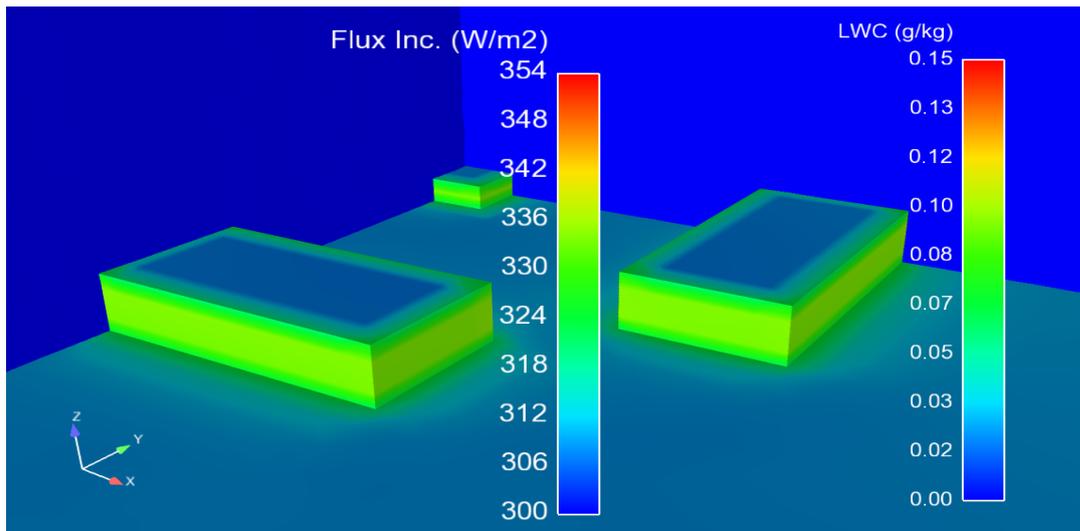


FIGURE 5.20 – Illustration des effets radiatifs 3-D générés par la présence de bâti

5.4.4 Les effets radiatifs 3-D

Sur la figure 5.20, le sol ainsi que le bâti ont été colorés par le flux incident. Les deux coupes verticales du contenu en eau liquide montrent que le brouillard n'a pas encore été formé. Le rayonnement reçu par les toits des bâtiments et le sol diffère de celui reçu par les murs. La méthode des ordonnées discrètes permet de prendre en compte les transferts radiatifs entre d'une part, le sol et les parois – le flux incident au sol autour des bâtiments ($325W.m^{-2}$) est plus important que dans le reste du domaine ($310W.m^{-2}$) – et d'autre part, entre les murs en vis-à-vis ($335W.m^{-2}$).

Les figures 5.21 sont trois captures d'écran d'un zoom effectué sur la zone du bâti. Les parois comprenant le sol et les bâtiments sont colorés par le flux incident. Sur les deux coupes verticales en x et en y , on a représenté le contenu spécifique en eau liquide. À 23h10 (figure 5.21a), l'eau liquide s'est formée au bord du domaine, puis a été advectée par le vent jusqu'aux bâtiments.

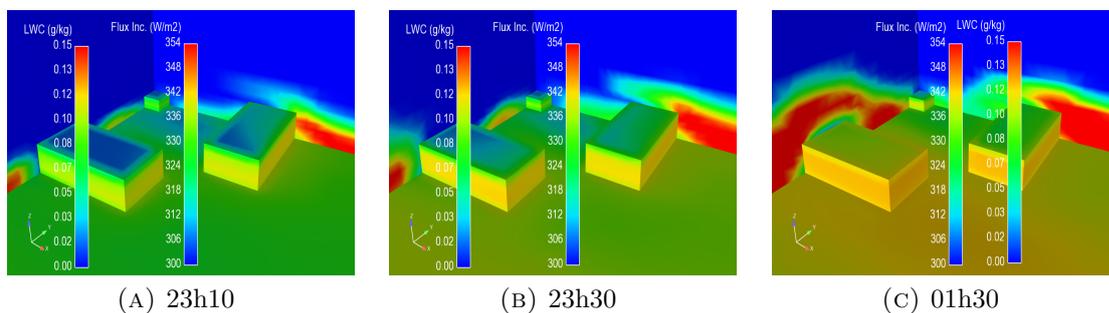


FIGURE 5.21 – Effets radiatifs 3-D entre l'eau liquide nuageuse, le sol et les parois des bâtiments

Sur la figure 5.21a le brouillard advecté commence à peine à survoler le bâtiments de droite. On peut ainsi observer la trace radiative de l'émission de l'eau liquide nuageuse sur le toit du bâtiment. Sur la figure 5.21b, on peut voir que le brouillard commence à passer au-dessus du bâtiment au premier plan augmentant ainsi le flux reçu par celui-ci.

Il est certain que ses effets radiatifs 3-D sont mineurs dans l'évolution de la structure du brouillard simulé. Les hétérogénéités spatiales du contenu en eau liquide ne sont pas générées par la variabilité spatiale du taux de refroidissement dans le domaine, mais par l'advection du brouillard depuis les bords du domaine dans le milieu bâti ; Ce cas permet simplement d'illustrer l'impact et les conséquences des hétérogénéités spatiales du contenu en eau liquide et la présence des bâtiments sur les transferts radiatifs.

Chapitre 6

Conclusions et Perspectives

Introduction

Ce dernier chapitre est consacré à la conclusion des différents travaux présentés dans ce manuscrit mais également, en perspective, aux aspects que nous n'avons pas pu aborder dans le cadre de ce travail. La première partie est consacrée à un rappel des travaux effectués durant la thèse. Nous effectuerons, ensuite, un retour sur les tests menés sur les quadratures, en illustrant les problématiques numériques liées à la résolution à la lumière d'un récent article. Puis, nous reviendrons sur le modèle en gaz gris développé, son potentiel et ses limites. La dernière partie énumèrera les différentes perspectives pour consolider la validation du modèle, pour le compléter et l'améliorer en vue de simuler un cycle de vie complet de brouillard radiatif.

Sommaire

6.1	Conclusion sur les différents travaux réalisés	126
6.1.1	Transfert thermique par rayonnement dans <i>Code_Saturne</i>	126
6.1.2	Résolution de l'ETR par la méthode des ordonnées discrètes	126
6.1.3	Un nouveau modèle gris pour l'absorption gazeuse dans l'atmosphère	126
6.1.4	Validation de notre paramétrisation	127
6.1.5	Un modèle permettant de capter des effets radiatifs 3-D .	127
6.2	Retour sur les quadratures	127
6.3	Retour sur le modèle en gaz gris développé	129
6.3.1	Remarques sur la validité du modèle	129
6.3.2	Remarques sur le potentiel du modèle	130
6.4	Perspectives	130
6.4.1	Temps de calcul et précision	130
6.4.2	L'émissivité du sol	131
6.4.3	L'extension de cette approche au rayonnement solaire . .	131
6.4.4	La modélisation 3-D d'un cycle de vie complet du brouillard radiatif	132
6.4.5	Comparaisons avec SHDOM et DART	132

6.1 Conclusion sur les différents travaux réalisés

6.1.1 Transfert thermique par rayonnement dans *Code_Saturne*

Dans le chapitre 1, nous avons présenté deux modèles de transfert radiatif infrarouge présent au début de cette thèse dans *Code_Saturne* :

- un modèle 3-D utilisant la méthode des ordonnées discrètes dans un milieu semi-transparent gris
- un modèle 1-D utilisant l'approximation « à deux flux » et un schéma en émissivité

Afin de comparer les deux approches, nous avons détaillé les expressions analytiques pour l'approche 1-D et les expressions discrètes pour l'approche 3-D des flux radiatif et du taux de réchauffement. Ce travail a permis de rassembler une partie des travaux sur le rayonnement effectués au département Mécanique des Fluides (Douce and Méchitoua, 2004), (Musson-Genon, 1995) et (Zhang et al., 2014) Énergie et Environnement d'EDF R&D, et de pouvoir homogénéiser le formalisme adopté pour décrire les transferts radiatifs pour la simulation d'écoulements réactifs ou d'écoulements de couche limite atmosphérique.

6.1.2 Résolution de l'ETR par la méthode des ordonnées discrètes

Au chapitre 2, nous avons détaillé la résolution spatiale et angulaire adoptée dans le code 3-D de rayonnement de *Code_Saturne*. La prise en main de ce module et sa migration vers la version 3.0 du code nous a permis d'actualiser les cas tests implantés par Douce and Méchitoua (2004) en ajoutant la cavité en « L » de Sakami et al. (1998) et le cylindre absorbant de Joseph (2004). Afin d'estimer les erreurs numériques liées à la méthode des ordonnées discrètes (discrétisation angulaire et spatiale), nous avons implémenté les quadratures S_4, S_6 et S_8 très largement utilisées dans la communauté du transfert radiatif mais également la quadrature $DCT020 - 2468$ de Koch et al. (1995) (quadrature S_6 généralisée), la quadrature LC_{15} et la quadrature T_N généralisée. Les différents tests numériques ont simplement confirmé les problématiques liées à la corrélation entre l'effet de rayon et la diffusion numérique déjà constatée depuis plus de 20ans. Ces quadratures offrent des possibilités supplémentaires quant au choix des paramètres numériques et au compromis coût de calcul et précision.

6.1.3 Un nouveau modèle gris pour l'absorption gazeuse dans l'atmosphère

Pour pouvoir effectuer notre comparaison 1-D/3-D sur un cas atmosphérique, nous avons tenté d'exprimer le coefficient d'absorption gris en fonction des émissivités. Pour ce faire, nous avons mené les calculs de façon analytique en partant de l'ETR grise 3-D. Nous lui avons appliquée toutes les hypothèses utilisées par le modèle 1-D pour obtenir la relation souhaitée. Le chapitre 3 constitue l'originalité de ce travail de thèse et propose une nouvelle paramétrisation de l'absorption gazeuse pour le rayonnement infrarouge atmosphérique.

6.1.4 Validation de notre paramétrisation

Le chapitre 4 est consacré à la validation de cette paramétrisation sur des cas académiques (atmosphère isothermes) et des cas plus réalistes (profils atmosphériques observés pendant la campagne ParisFog (Haeffelin et al., 2010)). Notre méthodologie est inspirée de celle mise en place par Ellingson et al. (1991). Elle permet d'incorporer au fur et à mesure la complexité de la résolution des transferts radiatifs atmosphériques. Ce chapitre a pour but de montrer qu'il existe une formulation grise des coefficients d'absorption à partir des émissivités. Les résultats obtenus montrent que le couplage de notre paramétrisation de l'absorption infrarouge avec la méthode des ordonnées discrètes permet d'obtenir des résultats très proches de ceux obtenus par le modèle 1-D, validant cette nouvelle approche.

6.1.5 Un modèle permettant de capter des effets radiatifs 3-D

Si la méthode DOM permet la prise en compte d'effets radiatifs 3-D liés à la géométrie complexe des parois émettantes et absorbantes du domaine, l'absorption gazeuse utilisant le modèle de propriétés optiques présenté ci-dessus est 1-D. Si cette hypothèse est supposée vraie pour les gaz à effet de serre, elle ne l'est plus du tout en présence de structures nuageuses 3-D. Notre modélisation permet de découpler l'absorption des gaz de celle de l'eau liquide et de calculer un coefficient d'absorption total 3-D.

Dans les deux sections suivantes, nous allons revenir plus en détail sur les effets numériques sous-jacents à l'utilisation d'une discrétisation angulaire et spatiale par la DOM; et sur la modélisation des propriétés radiatives infrarouges pour des applications atmosphériques, développée durant la thèse.

6.2 Retour sur les quadratures

Au début de cette thèse, *Code_Saturne* disposait de deux quadratures dont le nombre et l'orientation des directions correspondaient à celle de Thurgood et al. (1995). Les poids des quadratures étaient calculés à partir de considérations géométriques détaillées dans la thèse de Martin (1992). La prise en main du module de transfert radiatif 3-D nous a conduit à modifier les poids selon Thurgood et al. (1995). La méthode des ordonnées discrètes utilisée pour la résolution des transferts radiatifs a bénéficié des avancées sur les quadratures initiées par Carlson et al. (1965) pour les applications de transport de neutron.

Les différents tests menés sur les quadratures ainsi que la bibliographie associée ont permis d'éclaircir les résultats, a priori numériquement inconsistants de certaines simulations. La disparité des résultats sur les chambres de combustion mais également sur notre configuration académique baptisé cas du Cooling-To-Space ont trouvé une explication à la lumière des récents résultats de Hunter and Guo (2015). Si la corrélation entre l'effet de rayon et la diffusion numérique introduite par le choix du schéma de fermeture pour la luminance aux faces internes, avait déjà été

établie, l'expression analytique de ces erreurs ainsi que leur dépendance aux propriétés optiques du milieu, et donc au maillage constituent une véritable avancée dans ce domaine. La rigueur scientifique avec laquelle les différents tests ont été menés par Hunter and Guo (2015) leur ont permis d'établir les liens entre les erreurs numériques liées à la discrétisation angulaire et à la discrétisation spatiale. L'expression de l'erreur de troncature en x associée à l'utilisation du schéma Upwind (ou Step) le long de la direction de propagation \vec{S}_k est la suivante :

$$E_z^k \propto \frac{k(z)\Delta z}{\mu_k} \left(1 - \frac{k(z)\Delta z}{\mu_k} \right) \quad (6.1)$$

Aussi, l'erreur de diffusion numérique (DN) globale obtenue par la méthode Root-Sum-Square s'écrit :

$$E_{\text{DN}} = \sqrt{\sum_{k=1}^{N_{\text{dir}}} (E_x^k)^2 + (E_y^k)^2 + (E_z^k)^2}, \quad (6.2)$$

avec Δz le pas de discrétisation spatial constant selon la direction z (qui n'est pas le cas dans nos simulations).

L'équation (6.2) met ainsi en évidence l'effet combiné de la discrétisation spatiale et angulaire. L'augmentation du nombre de directions sans modifier la discrétisation spatiale conduit inéluctablement à accroître E_{DN} . Cet effet, déjà constaté sur des cas de simulation des transferts radiatifs dans des enceintes de combustion (Chai et al., 1993) (Coelho, 2002), l'est également sur des cas atmosphériques (section 4.2.4). Un travail de recherche bibliographique, ainsi qu'une étude portant sur l'influence de la taille de maille utilisée dans nos applications atmosphériques devraient être effectués afin de confirmer et d'illustrer les nouveaux résultats de Hunter and Guo (2015).

La dépendance de nos résultats à la quadrature est liée à l'utilisation des émissivités « diffuses ». Dans la formulation de l'émissivité (section 1.2.2.4) utilisant la transmittivité diffuse (section 1.2.2.2), la variation angulaire est représentée par une inclinaison moyenne $1/\tilde{\mu} = 5/3$ (Elsasser, 1942). Parmi les résultats de Ponnulakshmi et al. (2012), on trouve une expression de l'émissivité sans l'utilisation de l'approximation diffuse :

$$\epsilon : \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^{+\infty} \left[1 - \mathcal{T}_\lambda \left(z, z', \frac{1}{\mu} \right) \right] \pi I_\lambda^o(z') d\lambda. \quad (6.3)$$

Cette émissivité directionnelle permet de calculer un coefficient d'absorption gris dont la valeur dépend de l'inclinaison. En effet, suivant le cosinus directeur μ , les photons vont parcourir une longueur plus ou moins grande. L'approximation diffuse est une paramétrisation simple (inclinaison moyenne de 48° de l'intégration sur l'angle solide de la transmittivité (directionnelle) $\mathcal{T}_\lambda \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right)$). En utilisant (6.3), nous sommes en mesure de fournir un coefficient d'absorption pour chacune des directions discrètes S^k :

$$k^\uparrow(z, 1/\mu^k) = 1/\mu^k \frac{\partial \epsilon^\uparrow}{\partial z} (0, z, 1/\mu^k) \frac{1}{[1 - \epsilon^\uparrow(0, z, 1/\mu^k)]} \quad (6.4)$$

$$k^\downarrow(z, 1/\mu^k) = -(1/\mu^k) \frac{\partial \epsilon^\downarrow}{\partial z} (z, z_\infty, 1/\mu^k) \frac{1}{[1 - \epsilon^\downarrow(z, z_\infty, 1/\mu^k)]} \quad (6.5)$$

(6.4) et (6.5) ainsi exprimés permettront de tester les quadratures et de mieux prendre en compte les différences de parcours des rayons dans la maille suivant l'inclinaison μ^k .

6.3 Retour sur le modèle en gaz gris développé

6.3.1 Remarques sur la validité du modèle

La première étape de la construction du modèle était de trouver une relation entre les coefficients d'absorption gris de l'ETR et les émissivités paramétrisant l'intégration sur la longueur d'onde des flux monochromatiques montant et descendant. Pour ce faire, nous avons considéré une atmosphère plan-parallèle isotherme et mené les calculs analytiques jusqu'à l'obtention de l'expression des flux en fonction de l'émissivité (4.3) et (4.4). Aussi, en considérant d'une part l'ETR grise (1.20) et en appliquant différentes hypothèses du modèle 1-D (atmosphère plan-parallèle, approximation diffuse et isothermie), nous avons relié les coefficients d'absorption gris aux flux montant et descendant (3.42) et (3.43). En remplaçant notre solution analytique du flux montant (4.3) dans l'expression du coefficient d'absorption montant (3.42), son expression dépend seulement des fonctions d'émissivité analytiques. En procédant de la même manière pour le coefficient d'absorption descendant, nous sommes donc en mesure de résoudre l'ETR grise à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes, avec pour arguments d'entrée (3.44) et (3.45).

L'expression de ces coefficients d'absorption n'a été possible qu'à l'aide de l'hypothèse d'isothermie grâce à laquelle nous disposons de solutions analytiques pour les flux. Nous aurions pu penser que les coefficients d'absorption n'étaient valables que pour une atmosphère isotherme. En testant (3.44) et (3.45) sur des profils atmosphériques réalistes, nous avons obtenu de bons résultats. Ces tests ont montré que l'incertitude liée aux méthodes numériques, était plus importante que l'erreur induite par la formulation « isotherme » des coefficients d'absorption.

De plus, la positivité des coefficients d'absorption (3.44) et (3.45) conforte la validité de ce modèle. Les fonctions $z \mapsto \epsilon : (0, z)$ et $z \mapsto \epsilon : (z_\infty, z)$ sont des fonctions respectivement croissantes et décroissantes en z . Leur dérivées respectives sont donc positives et négatives assurant aux coefficients d'absorption gris calculés d'être positifs. Concernant l'analyse dimensionnelle, ces coefficients d'absorption s'expriment bien en m^{-1} et représentent donc bien l'inverse d'un libre parcours moyen. En revanche, ils dépendent des chemins optiques intégrés entre 0 et z et z_∞ et z ce qui leur confèrent un caractère non local.

D'autre part, distinguer un coefficient d'absorption montant et descendant est une idée suggérée par Edwards (1996) mais les distinguer et les calculer à partir des émissivités est une vraie nouveauté. Dans les problématiques de modélisation inverse du rayonnement atmosphérique, il existe des relations très proches de notre modèle, entre le coefficient d'absorption et les transmittivités (Lenoble, 1993). Dans l'article de Tessé and Lamet (2011), sur les modèles de rayonnement utilisés par l'ONERA, une relation entre la transmittivité le long d'un chemin optique et le co-

efficient d'absorption est donnée et nous a permis par une analyse dimensionnelle de nous assurer du sens physique de (3.44) et (3.45).

6.3.2 Remarques sur le potentiel du modèle

Ce modèle d'absorption traite de manière unidimensionnelle les propriétés radiatives des trois gaz à effet de serre. Considérer l'homogénéité horizontale des concentrations gazeuses est une approximation très répandue dans la communauté du transfert radiatif atmosphérique (Evans, 1998). Le caractère 3-D des propriétés optiques du milieu apparaît avec la présence d'eau liquide nuageuse. L'utilité du modèle est de pouvoir découpler le coefficient d'absorption du milieu gazeux et celui de l'eau liquide. Contrairement à l'approche du modèle 1-D qui considère une émissivité totale { gaz + liquide }, la formulation du coefficient d'absorption liquide est indépendante de celle des gaz. Cette décomposition permet donc de calculer des coefficients d'absorption globaux 3-D (6.6).

$$k^{\uparrow\downarrow}(x, y, z) = k_{\text{gaz}}^{\uparrow\downarrow}(z) + k_{\text{liq}}(x, y, z) \quad (6.6)$$

Ce modèle n'est pas limité aux applications à l'échelle locale (quartier urbain, site industriel) et peut être utilisé pour des plus grandes échelles, dans la mesure où l'homogénéité horizontale des concentrations gazeuses reste valable.

6.4 Perspectives

6.4.1 Temps de calcul et précision

Si le gain en temps calcul n'a pas été mis en avant dans la présentation du modèle, c'est que nous n'avons pas pu comparer les temps calculs en utilisant un modèle CKD et notre modèle gaz gris. En revanche nous pouvons donner quelques chiffres montrant l'augmentation du coût calcul en effectuant du rayonnement 3-D et sa part dans le temps de calcul.

TABLE 6.1 – Quelques informations sur les temps de calcul du modèle de rayonnement 3-D

Ndirs	Two-Stream	32	48	80	120	128
CFD + rayt 1D + rayt 3D	297 s	903 s	1374 s	2261 s	2695 s	3600 s
rayt 3D	0 s	606 s	1077 s	1958 s	2398 s	3303 s
% du rayt 3D	0	67.1	78.4	86.6	89.0	91.8

Une première remarque concernant la deuxième et la troisième ligne du tableau 6.1 doit être faite. Le modèle de rayonnement atmosphérique infrarouge 3-D a été ajouté au module atmosphérique utilisant déjà un modèle de rayonnement 1-D, si bien que les écarts absolus de temps de calcul (ligne 3 du tableau) représentent le temps passé dans le rayonnement 3-D. D'autre part, le modèle radiatif 3-D développé n'est pas optimisé et nécessite d'être informatiquement nettoyé. Toutefois, ces valeurs illustrent

bien la problématique du temps de calcul dans la prise en compte du rayonnement dans les études d'ingénierie. Celui-ci représente entre 70% et 90% du temps de calcul de la simulation. Pour un modèle à N_{bandes} spectrales pour effectuer l'intégration sur le spectre, il faut N_{discret} points de discrétisation sur chaque bande spectrale. Un des codes radiatifs de références utilisé dans des études couplées à la mécanique des fluides, SHDOM, utilise environ une soixantaine de point de discrétisation sur l'ensemble des 12 bandes spectrales (Fu and Liou, 1992). Le modèle utilisé dans RRTM (Mlawer et al., 1997) utilise 256 points de discrétisation (pour l'intégration sur la longueur d'onde), 140 pour le modèle du centre européen de Morcrette et al. (2008). Hogan (2010) a adapté le modèle FSCK pour n'utiliser qu'une vingtaine de points de quadrature. Le principe du modèle en gaz gris est de n'utiliser qu'un coefficient d'absorption. Le modèle développé permet de diviser par un facteur 20 le nombre d'équations des transferts radiatifs résolues pour le moins coûteux des modèles CKD cités dans cette section. Malgré cette économie, on observe que 2/3 du temps de calcul des simulations est consacré aux calculs radiatifs.

Après le nettoyage et l'optimisation du code, il serait donc intéressant de comparer les temps de calcul de notre modèle avec ceux des modèles CKD évoqués dans le paragraphe précédent afin d'illustrer le gain obtenu avec l'utilisation du modèle. Par ailleurs, cette étude permettrait de donner une gamme des erreurs commises par les calculs radiatifs. Le benchmark proposé par le projet CIRC (Oreopoulos and Mlawer, 2010) permettrait d'évaluer les performances de notre modèle radiatif quant à sa capacité à calculer les flux et le taux de réchauffement et à capter les effets radiatifs 3-D en présence de structures nuageuses.

6.4.2 L'émissivité du sol

Pour toutes nos simulations, nous avons considéré que les parois comme le sol, les murs et les toits des bâtiments étaient noires et donc imposé une émissivité égale à 1. L'article de Ponnulakshmi et al. (2012) a montré que la partie réfléchie du flux incident au sol, dans l'expression du flux montant était erronée. La conséquence était un sur-refroidissement infrarouge en proche surface qui modifiait significativement le développement de la couche limite nocturne. Si nous avons réécrit le terme de réflexion du flux montant dans le code 1-D, il est nécessaire de regarder en détail l'activation du terme de réflexion dans la condition à la limite de la luminance aux parois dans le code 3-D.

6.4.3 L'extension de cette approche au rayonnement solaire

Le cadre de ces travaux est restreint à l'étude de la couche limite nocturne. En vue de simuler un cycle complet de brouillard radiatif, et donc de simuler sa dissipation, il est primordial de prendre en compte le rayonnement solaire. Il serait intéressant d'adopter une approche similaire à celle utilisée pour notre paramétrisation, pour modéliser l'absorption dans les courtes longueurs d'onde. D'autre part, si nous avons négligé la diffusion dans l'infrarouge, elle ne peut l'être dans le solaire. Une résolution combinant les méthodes $\mathcal{P}_{\mathcal{N}}$ (Harmoniques Sphériques) où la diffusion est explicite et la méthode des ordonnées discrètes, comme le propose le code SHDOM (Evans,

1998) permettrait de prendre en compte la diffusion à moindre coût.

6.4.4 La modélisation 3-D d'un cycle de vie complet du brouillard radiatif

Des études du brouillard radiatif 3-D ont été effectuées à l'aide d'un couplage radiatif 1-D. La modélisation des propriétés radiatives proposée dans cette thèse a été conçue dans l'intention de pouvoir simuler la formation et l'évolution du brouillard en prenant en compte certains effets radiatifs 3-D. La simulation 3-D présentée à la section 5.4 a été réalisée de façon académique, puisque seule la partie formation du brouillard évolue uniquement sous les effets des forçages locaux (température de surface et rayonnement infrarouge).

Si l'on veut modéliser le cycle complet de brouillard radiatif mesuré durant la POI13 de la campagne ParisFog, il est nécessaire de tenir compte du forçage atmosphérique de plus grande échelle par le biais des conditions aux limites latérales. Pour ce faire, il faudrait pouvoir mettre des conditions thermodynamiques de type Dirichlet sur les variables thermodynamiques, et garder des conditions périodiques pour le rayonnement ou trouver une formulation adaptée pour la luminance sur les bords du domaine. Ce travail reste à réaliser puisque les conditions aux limites radiatives et thermodynamiques ne peuvent pas être découplées dans la version actuelle de *Code_Saturne*.

Une fois ce problème résolu, une simulation 3-D réaliste, tenant compte de toute la complexité du site, tel que simulé par Zaïdi et al. (2013) pourrait alors être effectuée et comparée aux points de mesure du SIRTa lors de la POI13.

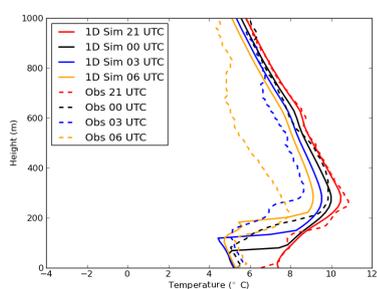
6.4.5 Comparaisons avec SHDOM et DART

Une comparaison sur des profils atmosphériques donnés, mais également sur des cas dynamiques avec des codes de transferts radiatifs sophistiqués tel que DART (Gastellu-Etchegorry et al., 1996) contribuerait à l'évaluation de notre paramétrisation de l'absorption, et de mieux comprendre l'influence des transferts radiatifs dans l'évolution diurne de la couche limite atmosphérique. Ce code de transfert radiatif est développé au CESBIO et permet de créer des scènes atmosphériques extrêmement proches du monde réel et d'effectuer des bilans radiatifs en prenant en compte toute l'anisotropie des transferts radiatifs en présence de végétation, d'un terrain complexe ou de bâti. Si cet outil est utilisé pour la télédétection par une centaine de Centres Spatiaux en raison de la précision avec laquelle le transfert radiatif atmosphérique est traitée, il peut également être utilisé comme solution de référence pour définir la gamme d'erreur produite par notre modèle 3-D et les limites de notre approche.

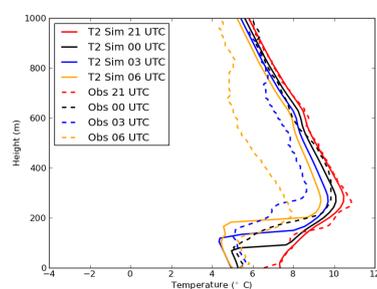
Annexes

Comparaison aux observations de ParisFog

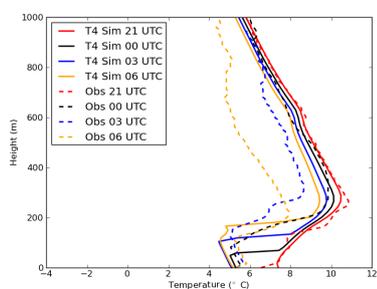
Profils de température



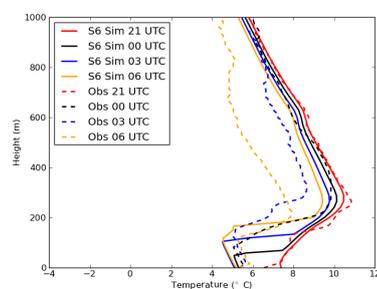
(A) 1-D



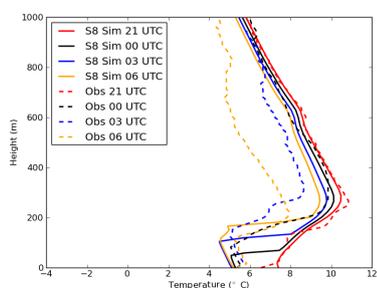
(B) T2



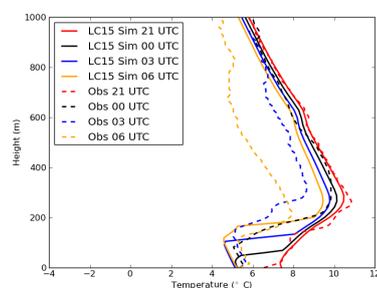
(C) T4



(D) S6



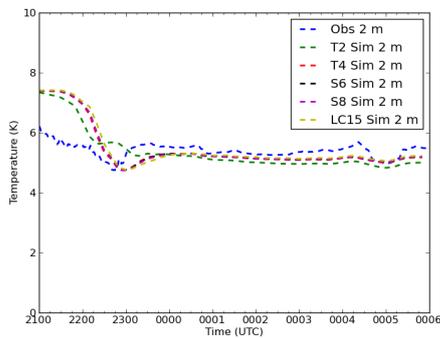
(E) S8



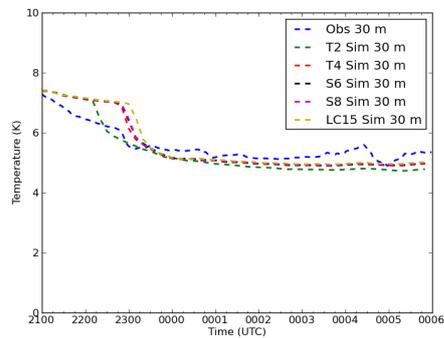
(F) LC15

FIGURE 6.1 – Évolution des profils de température - comparaisons des simulations aux mesures de ParisFog

Température à 2m et 30m



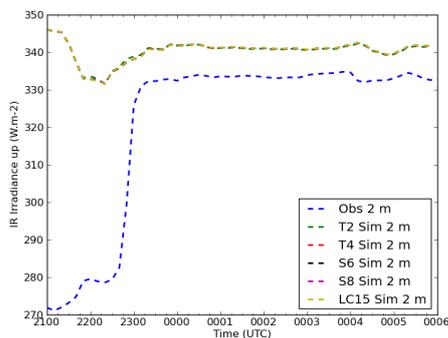
(A) température à 2m



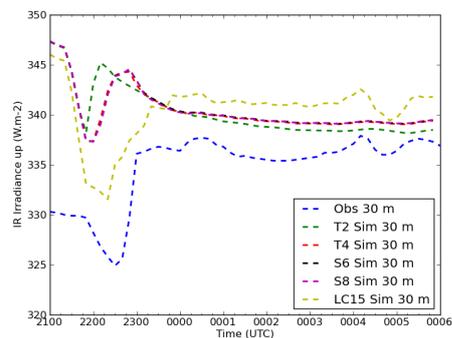
(B) température à 30m

FIGURE 6.2 – Température à 2m et 30m - comparaisons des simulations aux mesures de ParisFog

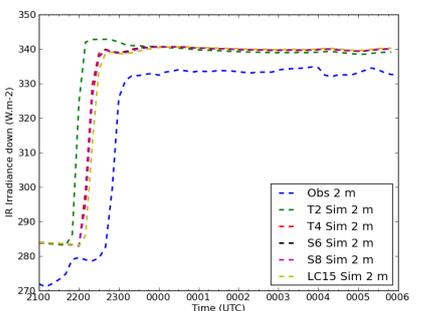
Flux à 2m et 30m



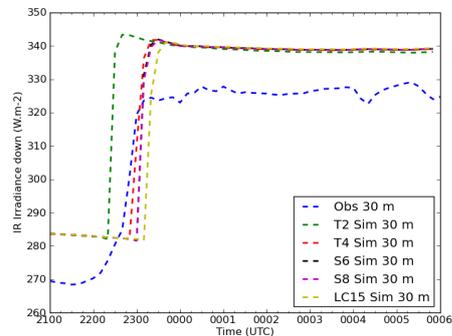
(A) flux montant à 2m



(B) flux montant à 30m



(C) flux descendant à 2m



(D) flux descendant à 30m

FIGURE 6.3 – Flux montant et descendant à 2m et 30m - comparaisons des simulations aux mesures de ParisFog

Formules pour le modèle en émissivité

Chemins optiques corrigés

$$u_{H_2O}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{H_2O}(z'') \left(\frac{P(z'')}{P_0} \sqrt{\frac{T_0}{T(z'')}} \right)^n dz''$$

$$u_{CO_2}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{CO_2}(z'') \left(\frac{P(z'')}{P_0} \right)^{3/4} dz''$$

$$u_{O_3}(z', z) = |f_{\text{Green}}(z) - f_{\text{Green}}(z')|$$

$$u_{\text{dim}}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{H_2O}(z'') e(z'') f(T(z''), T_0) dz''.$$

where $f(T(z''), T_0) = \exp \left[1800 \left(\frac{1}{T(z'')} - \frac{1}{296.0} \right) \right]$ and $f_{\text{Green}} = a \frac{1 + e^{-b/c}}{1 + e^{(z-b)/c}}$ with $a = 0.4 \text{ cmNTP}$, $b = 20 \text{ km}$, c chosen as $b/c = 5$ (Green, 1964)

Fonctions analytiques d'absorption

Sasamori (1968) formula for water vapor, carbon dioxide and ozone :

$$\epsilon_{H_2O}(u_{H_2O}) = \begin{cases} 0.846 * (3.59 \times 10^{-5} + u_{H_2O}/10.)^{0.243} \\ \text{for } u_{H_2O} < 0.1 \text{ kg.m}^{-2} \\ 0.24 \log_{10} (0.01 + u_{H_2O}/10.) + 0.622 \\ \text{for } u_{H_2O} \geq 0.1 \text{ kg.m}^{-2} \end{cases}$$

$$\epsilon_{CO_2}(u_{CO_2}) = \begin{cases} 0.0676 * (0.01022 + u_{CO_2})^{0.421} - 0.00982 \\ \text{for } u_{CO_2} < 1 \text{ cmNTP} \\ 0.24 \log_{10} (0.0676 + u_{CO_2}) + 0.622 \\ \text{for } u_{CO_2} \geq 1 \text{ cmNTP} \end{cases}$$

$$\epsilon_{O_3}(u_{O_3}) = \begin{cases} 0.209(u_{O_3} + 7.0 \times 10^{-5})^{0.436} - 3.21 \times 10^{-3} \\ \text{for } u_{O_3} < 0.01 \text{ cmNTP} \\ 7.49 \times 10^{-2} + 2.12 \times 10^{-2} \log_{10} (u_{O_3}) \\ \text{for } u_{O_3} \geq 0.01 \text{ cmNTP} \end{cases}$$

$$T_{15\mu}(u_{H_2O}) = \begin{cases} 1.33 - 0.832(u_{H_2O}/10. + 0.0286)^{0.26} \\ \text{for } u_{H_2O} < 20 \text{ kg.m}^{-2} \\ 0.33 - 0.2754(\log_{10} (u_{H_2O}/10.) - 0.3011) \\ \text{for } u_{H_2O} \geq 20 \text{ kg.m}^{-2} \end{cases}$$

(Veyre et al., 1980) for water vapor dimer :

$$\epsilon_{dim}(u_{dim}) = \begin{cases} 0.4614 \left[1 - \frac{\sum_{i=0}^2 a_i u_{dim}^i}{\sum_{j=0}^3 b_j u_{dim}^j} \right] \\ \text{for } u_{dim} \leq 0.5 \text{ g.cm}^{-2} \\ \\ 0.4614 \\ \text{for } u_{H_2O} > 0.5 \text{ g.cm}^{-2} \end{cases}$$

with $a_0 = 0.015075$, $a_1 = -0.036185$, $a_2 = 0.0019245$, $b_0 = a_0$, $b_1 = 0.19547$, $b_2 = 0.75271$, $b_3 = 1$

$$T_w(u_{H_2O}) = \frac{\left(\sum_{i=0}^4 a'_i u_{dim}^i \right)}{\left(\sum_{j=0}^5 b'_j u_{dim}^j \right)}$$

with $a'_0 = 7.76192 \times 10^{-7}$, $a'_1 = 1.33836 \times 10^{-3}$, $a'_2 = 0.166649$, $a'_3 = 2.17686$, $a'_4 = 2.6902$, $b'_0 = 7.79097 \times 10^{-7}$, $b'_1 = 1.36832 \times 10^{-3}$, $b'_2 = 0.179601$, $b'_3 = 2.70573$, $b'_4 = 5.15119$, $b'_5 = 1$

Article soumis

A New Fast Method to Compute Three-Dimensional Atmospheric Infrared Radiative Transfer in Non Scattering Medium

LAURENT MAKKÉ*, LUC MUSSON-GENON, BERTRAND CARISSIMO,

CEREA, joint laboratory École des Ponts ParisTech - EDF R&D, Université Paris-Est, 77455 Marne la Vallée, Cedex 2, France

PIERRE PLION, MAYA MILLIEZ, ALEXANDRE DOUCE

EDF R&D, 6 Quai Watier, Chatou 78400, France

ABSTRACT

The Atmospheric Radiation field has seen the development of more accurate and faster methods to take into account absorption. Modelling fog formation, where Infrared Radiation is involved, requires accurate methods to compute cooling rates. Radiative fog appears with clear sky condition due to a significant cooling during the night where absorption is the dominant process. Thanks to High Performance Computing, multi-spectral approaches of Radiative Transfer Equation resolution are often used. Nevertheless, the coupling of three-dimensional radiative transfer with fluid dynamics is very computationally expensive. Radiation increases the computation time by around fifty percent over the pure Computational Fluid Dynamics simulation. To reduce the time spent in radiation calculations, a new method using analytical absorption functions fitted by Sasamori on Yamamoto's radiation chart has been developed to compute an equivalent absorption coefficient (spectrally integrated). Only one resolution of Radiative Transfer Equation is needed against $N_{\text{band}} \times N_{\text{gauss}}$ for an N_{band} model with N_{gauss} quadrature points on each band. A comparison with simulation data has been done and the new parameterization of Radiative properties proposed in this article shows the ability to handle variations of gases concentrations and liquid water.

1. Introduction

Infrared radiation (IR) is a physical process which plays a preeminent role in atmospheric physics - especially through interaction with clouds. It is the most important physical phenomenon which drives radiation fog formation (Davis 1994). To study atmospheric radiation the question arises to adopt a 1-D, 2-D or 3-D approach to compute radiative transfers (RT). Many sophisticated treatments of the Radiative Transfer Equation (RTE) – Monte-Carlo Method (MMC) (Fleck 1961) for angular integration and Line-by-line (LBL) calculations for the integration over the spectrum (Rothman et al. 1992) – aim to simulate accurately radiative processes. However, as it is the case in many atmospheric simulations, radiative processes are only one aspect of the whole modelling problem. Once RT is coupled with Fluid Dynamics, the balance energy equation has to be solved within the computation of the heating or cooling rate. This procedure is still time consuming even if RT calculations may be activated periodically (RT are assumed unchanged during a period of time).

Therefore an equilibrium between accuracy and computing cost should be found to compute radiative quantities in 3-D simulation. SHDOM (Evans 1998) proposes a good compromise to compute 3-D RT by combining a directional resolution with a multi-spectral method. In many meteorological applications, band models are commonly employed to compute the spectral integration. In these schemes, the averaged transmissions are computed across spectral bands. For statistical band models, hypothesis on the line spacing are considered to perform the integration over the spectrum (Goody 1952; Malkmus 1967). Another widely used approach consists in the integration over the values of the absorption coefficient (Correlated K-Distribution (CKD) method) to compute the transmission (Lacis and Oinas 1991) (Fu and Liou 1992). Mathematically, it consists in taking Lebesgue's definition of the integral for the transmission calculation. However, most atmospheric cases, such as studies of the Nocturnal Boundary Layer (NBL) use emissivity schemes to treat the spectral dependence of the RTE (Viskanta et al. 1977; Varghese et al. 2003; Savijärvi 2006; Edwards 2009; Siqueira and Katul 2010). For its computational efficiency, broadband emissivity schemes are a useful approach to highlight the interaction of radiation with other transport processes. The concept

*Corresponding author address: Luc Musson-Genon, France EDF R&D, 6 Quai Watier, Chatou, 78400
E-mail: luc.musson-genon@edf.fr

of broadband emissivities was introduced by Elsasser (1942) and Yamamoto (1952) produced a radiation chart on which Sasamori (1968) fitted analytical expression of emissivities.

The radiative model developed by Musson-Genon (1987) in the Computational Fluid Dynamics (CFD) software *Code.Saturne* (Archambeau et al. 2004) with this parameterization in infrared wavelength shows good agreements with measurements made during fog events such as ParisFog in 2006 (Zhang et al. 2014). Although a case study with a 3-D mesh – for CFD – has been done, radiative exchanges were assumed unidimensionnal. The presence of buildings and vegetation make radiative transfers three-dimensional. It changes at least the surface of emission. What lies behind three-dimensional radiative transfers is that there is “no assumption about the translational or rotational symmetry of the optical mediums macro-structure nor about the sources of radiation” (Davis and Marshak 2004, chap. 3).

Moreover, if we can reasonably assume that atmospheric gases concentration is horizontally homogeneous, horizontal radiative effects induced by heterogeneous liquid water field or complex terrain with buildings and vegetation should be taken into account with a 3D solver (Hoch et al. 2011). In local scale models with a fine spatial discretization, a MMC is unusable for its very high computational cost when several radiative outputs are needed (Evans 1998) (the 3D heating rate field). MMC - like LBL method to calculate the integration over the spectrum- are used as a reference solution for benchmark (Modest 2003). The discrete ordinates method (DOM) is a good alternative to MMC to reduce the computational time. First proposed by Chandrasekhar (1950), the DOM is based on the directional variation of the radiative radiance. The RTE is solved for a set of discrete directions spanning the total solid angle of 4π . The integral over the solid angle is replaced by a discrete weighted sum (quadrature).

The purpose of this paper is to give a gray formulation of radiative properties for 3-D resolution using the DOM of gray RTE (equivalent absorption coefficient), based on the emissivity formula of Sasamori (1968). Under the Cooling-To-Space (CTS) approximation, exact expression of upward and downward fluxes are provided (see Lenoble 1993). Thus, equivalent absorption coefficients can directly be linked with emissivities. By separately treating upward and downward fluxes, we propose a formulation for upward and downward equivalent absorption coefficients which respectively depends on upward and downward emissivities. This expression mathematically ensures the positivity of equivalent absorption.

The paper is organized according to the following outline:

1. Analytical calculations are performed in section 2 to provide analytical 1-D solutions of the RTE within broadband emissivity definition under the CTS approximation
2. By using the two formulations of the RTE (the differential and the integral), a relation between equivalent absorption coefficient and emissivity is found in section 3 for the 3-D radiation code
3. In section 4, numerical results are shown for clear sky and cloudy conditions. A comparison between the 1D (Two-Stream approach using broadband emissivity) and the 3D radiation code of *Code.Saturne* is performed (DOM + equivalent absorption coefficient). For cloudy atmosphere, we used atmospheric profiles from the ParisFOG field experiment from the Intensive Observation Period number 13, simulated by Zhang et al. (2014)

2. The Broadband Emissivity for 1-D Modelling

a. The Two-Stream approximation

For a non scattering medium, the RTE may be written as follows:

$$(\vec{s} \cdot \vec{\nabla}) I_\lambda = -k_\lambda I_\lambda + k_\lambda I_\lambda^o \quad (2.1)$$

where \vec{s} is the propagation direction of the radiance I_λ , k_λ is the absorption coefficient in m^{-1} and the source term is given by the Planck function $I_\lambda^o = 2hc^2\lambda^{-5} / (e^{hc/k_B\lambda} - 1)$

Under the plane parallel hypothesis, (2.1) becomes:

$$\mu \frac{\partial I_\lambda}{\partial z} = -k_\lambda I_\lambda + k_\lambda I_\lambda^o \quad (2.2)$$

where μ is the cosine of the zenith angle θ . Separating the RTE according to upwards or downwards directions leads to define the upward and the downward radiances:

$$\begin{aligned} I_\lambda^\uparrow(z, \mu) &= I_\lambda(z, \mu), \mu > 0 \\ I_\lambda^\downarrow(z, \mu) &= I_\lambda(z, -\mu), \mu > 0 \end{aligned}$$

to obtain from (2.2) the system:

$$\mu \frac{\partial I_\lambda^\uparrow(z, \mu)}{\partial z} = -k_\lambda(z) \left[I_\lambda^\uparrow(z, \mu) + I_\lambda^o(z) \right] \quad (2.3)$$

$$\mu \frac{\partial I_\lambda^\downarrow(z, \mu)}{\partial z} = k_\lambda(z) \left[I_\lambda^\downarrow(z, \mu) - I_\lambda^o(z) \right]. \quad (2.4)$$

The expressions for fluxes are obtained by integrating over the solid angle, the integral form of RTE for upward

and downward radiances.

$$F^\uparrow(z) = \int_0^{+\infty} \pi I_\lambda^o(0) \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(0, z) d\lambda - \pi \int_0^{+\infty} \int_0^z I_\lambda^o(z') \frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(z', z)}{\partial z'} dz' d\lambda \quad (2.5)$$

$$F_\lambda^\downarrow(z) = \pi \int_0^{+\infty} \int_{+\infty}^z I_\lambda^o(z') \frac{\partial \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(z, z')}{\partial z'} dz' d\lambda. \quad (2.6)$$

where $\tilde{\mathcal{T}}_\lambda$ is the monochromatic diffuse transmittance,

$$\tilde{\mathcal{T}}_\lambda(z', z) = 2 \int_0^1 \mathcal{T}_\lambda\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \mu d\mu, \quad (2.7)$$

and \mathcal{T}_λ the monochromatic transmittance

$$\mathcal{T}_\lambda\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) = \exp\left(-\frac{1}{\mu} \int_{z'}^z k_\lambda(s) ds\right). \quad (2.8)$$

b. The Broadband Emissivity

Radiative quantities should now be integrated over the wavelength to compute the net flux and the heating rate. Most of radiation applications in the atmospheric community are performed using the Correlated-K Distributions (Fu and Liou 1992). But in operational models the computation cost is the decisive factor. An alternative method is to use a broadband emissivity scheme, which parameterizes the total emissivity of an isothermal layer over the whole spectrum. The Isothermal Broadband Emissivity (Liou 2002) along $z' \rightarrow z$ is defined as follows:

$$\varepsilon : (z', z) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^{+\infty} \left[1 - \tilde{\mathcal{T}}_\lambda(z, z')\right] \pi I_\lambda^o(z') d\lambda. \quad (2.9)$$

For non homogeneous path, it is common to introduce the corrected path length of water vapor, carbon dioxide and ozone.

$$u_g(z', z) = \int_{z'}^z \rho_g(z'') \mathcal{F}(T_0, P_0, T, P) dz''$$

where \mathcal{F} is a scaling function eliminating the dependence of the absorption coefficient on pressure and temperature. These corrections, known as the one-parameter scaling approximation, are attributed to Chou and Arking (1980). The emissivity $\varepsilon(z', z)$ for each gas is now a function of the scaled path $\varepsilon(u_g(z', z))$. The total emissivity for the three dominant atmospheric gases in the infrared domain is:

$$\begin{aligned} \varepsilon(z', z) &= \varepsilon_{H_2O}(u_{H_2O}(z', z)) + \varepsilon_{O_3}(u_{O_3}(z', z)) \\ &+ \varepsilon_{CO_2}(u_{CO_2}(z', z)) T_{15\mu}(u_{H_2O}(z', z)) \\ &+ \varepsilon_{\text{dim}}(u_{\text{dim}}(z', z)) T_w(u_{H_2O}(z', z)). \end{aligned} \quad (2.10)$$

where $T_{15\mu}$ and T_w are the transmittivity of water vapor in the 15 μ band and rotation band respectively, and ε_{dim} the emissivity of water vapor dimers (H_2O)₂.

The problem of gas overlapping has been treated by using integrated emissivity and transmittivity function. The expression of ε_{H_2O} , ε_{CO_2} , $T_{15\mu}$ and T_w are available in Appendix A. Fluxes, integrated over the spectrum may be written as follows (Stephens 1984):

$$F^\uparrow \cong \sigma T_g^4 (1 - \varepsilon(z, 0)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\varepsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (2.11)$$

$$F^\downarrow \cong \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\varepsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (2.12)$$

where z_∞ is the height at the top of the atmosphere (TOA).

For a non black wall, σT_g^4 is replaced by $\varepsilon_g \sigma T_g^4 + (1 - \varepsilon_g) F^\downarrow(0)$ – where ε_g is the ground emissivity – which leads to:

$$F^\uparrow \cong \left[\varepsilon_g \sigma T_g^4 + (1 - \varepsilon_g) F^\downarrow(0) \right] (1 - \varepsilon(z, 0)) - \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\varepsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (2.13)$$

$$F^\downarrow \cong \int_z^{z_\infty} \sigma T^4(z') \frac{d\varepsilon}{dz'}(z', z) dz' \quad (2.14)$$

Actually, the reflected term at the ground, $(1 - \varepsilon_g) F^\downarrow(0)$ is subject to controversy. Edwards (2009) and Ponnulakshmi et al. (2009) pointed out a spurious near surface cooling. Physical considerations about the spectrum of downward flux prove that the reflected flux should not be attenuated by $(1 - \varepsilon(z, 0))$ – because what has not been absorbing along z to 0 remains transparent along 0 to z after reflection – and should be rewritten (Ponnulakshmi et al. 2012):

$$\begin{aligned} F^\uparrow &\cong \varepsilon_g \sigma T_g^4 (1 - \varepsilon(z, 0)) \\ &+ (1 - \varepsilon_g) \int_0^{z_\infty} \sigma T^4(z') \varepsilon(-z, z') \\ &- \int_0^z \sigma T^4(z') \frac{d\varepsilon}{dz'}(z', z) dz' \end{aligned} \quad (2.15)$$

$(1 - \varepsilon_g) \int_0^{z_\infty} \sigma T^4(z') \varepsilon(-z, z')$ can be seen as a downward radiation along $-z$ and z_∞ . To ensure a correct formulation, we will consider the ground as a blackbody, i.e $\varepsilon_g = 1$ for all simulations.

By assuming an isothermal atmosphere with a temperature discontinuity between the ground and the air, the integral terms vanish:

$$F^\uparrow(z) = \sigma T_g^4 (1 - \varepsilon(z, 0)) + \varepsilon(z, 0) \sigma T_A^4 \quad (2.16)$$

$$F^\downarrow(z) = \varepsilon(z, z_\infty) \sigma T_A^4 \quad (2.17)$$

This analytical solution is exact for an isothermal plane-parallel atmosphere.

3. Analytical expression of grey absorption coefficient for 3-D Modelling

By replacing (2.16) and (2.17) for an isothermal atmosphere in the “flux form” of the RTE, the absorption coefficient is directly linked to emissivities. To formulate the upward and downward equivalent extinction, let us consider the grey RTE in a non scattering media.

$$(\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) I(s, \vec{S}) = -k(s)I(s, \vec{S}) + k(s)I^o(s), \quad (3.1)$$

where s is the position in space and with

$$I(s, \vec{S}) = \int_{\lambda=0}^{\infty} I_{\lambda}(s, \vec{S}) d\lambda$$

$$k(s) = \int_{\lambda=0}^{\infty} k_{\lambda}(s) I_{\lambda}(s, \vec{S}) d\lambda \Big/ \int_{\lambda=0}^{\infty} I_{\lambda}(s, \vec{S}) d\lambda$$

$$I^o(s) = \int_{\lambda=0}^{\infty} I_{\lambda}^o(s) d\lambda = \sigma T^4(s) / \pi$$

the radiative quantities spectrally integrated.

Under the hypothesis of a plane parallel atmosphere, we can write the equations governing the upward and downward radiances – see for example (Lenoble 1993) :

$$\mu \frac{\partial I^{\uparrow}}{\partial \tau}(\tau, \mu) = -I^{\uparrow}(\tau, \mu) + I^o(\tau) \quad (3.2)$$

$$\mu \frac{\partial I^{\downarrow}}{\partial \tau}(\tau, \mu) = I^{\downarrow}(\tau, \mu) - I^o(\tau), \quad (3.3)$$

where $\tau = \int_0^z k(z') dz'$ is the optical path.

To obtain the equations for fluxes, an integration over the zenith angle must be completed. A widely used approximation is to eliminate the zenith angle dependance in favor of a constant inclination $\tilde{\mu}$ so that $\tilde{\mu}^{-1} = 5/3$, well-known as *Diffusivity factor* (Elsasser 1942). This is equivalent to taking a zenith angle equal to zero but an optical path expanded by a factor of 5/3. Relying on hemispheric isotropy, (3.2) and (3.3), written in z coordinates, become:

$$\frac{\partial F^{\uparrow}}{\partial z}(z) = -\frac{5}{3}k(z) [F^{\uparrow}(z) - \sigma T^4(z)] \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial F^{\downarrow}}{\partial z}(z) = \frac{5}{3}k(z) [F^{\downarrow}(z) - \sigma T^4(z)], \quad (3.5)$$

By using the analytical expression of fluxes for an isothermal atmosphere, (2.16) and (2.17), the above leads to:

$$k^{\uparrow}(z) = \frac{3}{5} \frac{\partial \varepsilon^{\uparrow}}{\partial z}(0, z) \frac{1}{[1 - \varepsilon^{\uparrow}(0, z)]} \quad (3.6)$$

$$k^{\downarrow}(z) = -\frac{3}{5} \frac{\partial \varepsilon^{\downarrow}}{\partial z}(z, z_{\infty}) \frac{1}{[1 - \varepsilon^{\downarrow}(z, z_{\infty})]}. \quad (3.7)$$

The upward and downward absorption coefficients depend on upward and downward emissivities, i.e they are both function of pressure, temperature but also of optical path. The difference with the monochromatic absorption coefficient is the non local nature of k^{\uparrow} and k^{\downarrow} . This formulation brings four remarks:

1. The two-stream approximation leads to two different equations for fluxes or radiances. In a sense, this is equivalent to applying a superposition principle. The heating rate is the contribution of the divergence of upward and downward fluxes. This is a valid hypothesis even if fluxes are coupled.
2. The dependence of k^{\uparrow} and k^{\downarrow} upon optical paths is due to the definition of equivalent absorption. They have been defined as functions which satisfy both equations (3.6) and (3.7). Analytical solutions of fluxes given for the CTS approximation are spatially integrated. They contain the optical information of the entire layer. It gives upward and downward coefficients their non local nature.
3. The expressions of k^{\uparrow} and k^{\downarrow} derive from mathematical considerations under the CTS approximation. Treating separately upward and downward directions for fluxes but also for extinction coefficients is not a new idea (Edwards 1996). Generally, $k^{\uparrow} \neq k^{\downarrow}$, but in a GCM the equivalent extinction is based on net fluxes. Assuming $k^{\uparrow} = k^{\downarrow}$ leads to the following expression:

$$k(z) = \frac{3}{5} \frac{-\frac{\partial F_{\text{net}}}{\partial z}}{F^{\uparrow}(z) + F^{\downarrow}(z) - 2\sigma T^4(z)} \quad (3.8)$$

Numerical problems may appear and we may have negative extinction. Separating upward and downward direction provides the positivity of the equivalent absorption coefficients.

4. The spectral profiles of downward and upward fluxes are totally different (Ponnulakshmi et al. 2012) which justifies to separate upward and downward directions for treating the spectral integration. This method may be considered as a special two bands model.

4. Numerical experiments

The 1-D radiation code used to provide reference solutions was validated on Cabaw (Musson-Genon 1987) and ParisFog field experiment (Zhang et al. 2014). On this dataset, which contains heating rates and radiative fluxes, the 1-D code shows its capability to simulate a full life cycle of fog. In order to verify the implementation of this new radiative properties model, we selected atmospheric profiles from the 6-month PARISFOG field experiment which took place in Paris (Haefelin et al. 2010). The

dataset contains 13 Intensive Observation Period (IOP) of fog or quasi fog events which formation and evolution are extremely sensitive to radiation. We selected profiles of water vapor concentration, temperatures and liquid water content as inputs of the radiation code and we compared the one-dimensional radiation scheme with the three-dimensional one, based on the Discrete Ordinates Method.

The simulated domain is rectangular $1\text{km} \times 1\text{km} \times 11\text{km}$ with periodic boundary conditions and constant concentration of gases in x and y directions. There are 78 cells up to 11km in z direction with a first level at 2m.

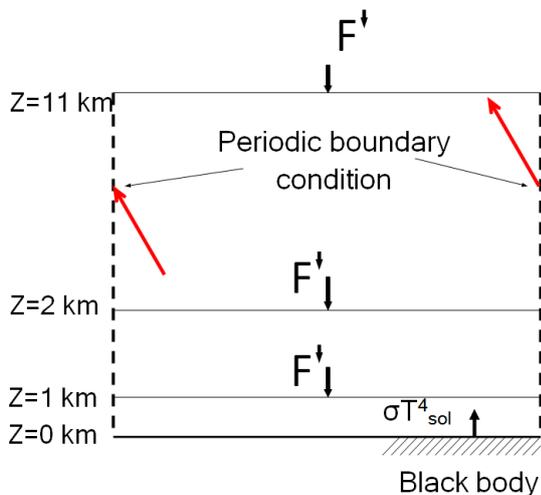


FIG. 1. Simulated domain with three different domain heights : 1km, 2km, 11km, periodic boundary conditions in x and y directions, $\epsilon_g = 1$

a. Isothermal atmosphere

As suggested by Ellingson and Fouquart (1991) and recommended by Varghese et al. (2003) it is very important to check model's outputs for an isothermal atmosphere. Upward fluxes are constant and downward fluxes are analytical. Therefore checking radiative outputs in this trivial case is a code verification. We first took a single column of water vapor, with a constant temperature of 270 K and no temperature gradient with the ground, meaning $T_g = T_A$. The vertical profile of water vapor - picked up among ParisFog dataset (IOP 18/19-02-2007 12h) is given on figure 2.

1) HEATING/COOLING RATE

As a source term of the energy balance equation, the heating rate S_{rad}

$$S_{\text{rad}} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}} \quad (4.1)$$

must be computed. A natural approach consists in first computing the radiative flux density $\vec{Q}_{\text{rad}} = \int_{\Omega=0}^{4\pi} I(\vec{s}) \vec{s} d\Omega$

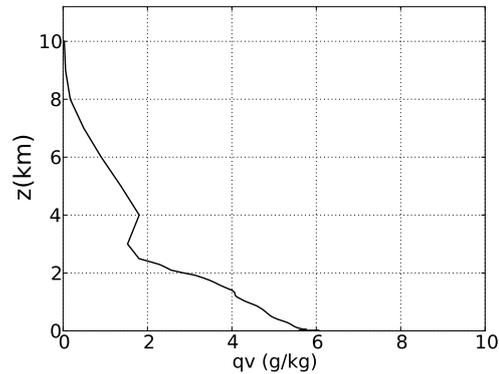


FIG. 2. Water vapor content profile from IOP 13 at 12h

and then its divergence. Another formulation of the heating rate can be found by integrating the RTE (3.1) over the solid angle.

$$\int_0^{4\pi} (\vec{s} \cdot \vec{\nabla}) I(s, \vec{s}) d\Omega = \int_0^{4\pi} [-k(s)I(s, \vec{s}) + k(s)I^o(s)] d\Omega \quad (4.2)$$

The permutation between the integral and the divergence operator gives the semi-analytic form of the radiative source term :

$$S_{\text{rad}}(s) = \int_{\Omega=0}^{4\pi} k(s)I(s, \vec{s}) d\Omega - 4k(s)\sigma T^4(s) \quad (4.3)$$

$-\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_{\text{rad}}$ is the conservative form of S_{rad} . The integration of (4.1) over a volume element dV leads to:

$$\int_V S_{\text{rad}} dV = - \int_{\Gamma} Q_{\text{net}} d\Gamma \quad (4.4)$$

where Γ is the surface of V and $Q_{\text{net}} = \vec{Q}_{\text{rad}} \cdot \vec{n}$ with \vec{n} a normal vector to Γ . So (4.1) respects the energy conservation (4.4).

Although the expression of the heating rate (4.1) and (4.3) are mathematically equivalent, their numerical implementations are different. We expect that the conservative (4.1) and the semi-analytic (4.3) formulations give different results. The later is indeed more accurate and this is easily explained given that the source term undergoes only a single integration over the solid angle. In addition, the conservative form needs the discretization of the divergence operator. Numerical treatments available in the code provide an error in $\mathcal{O}(h)$ where h is the spatial step size (Douce and Méchitoua 2004).

2) UPPER BOUNDARY LAYER

An important aspect of the numerical simulation are the boundary conditions. The plane-parallel atmosphere assumption leads to set periodic boundary conditions in

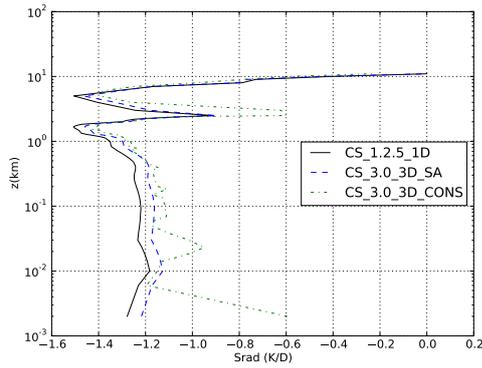


FIG. 3. Heating rate (K/Day), isothermal atmosphere : $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270\text{K}$, water vapor only, domain height : 11km, *Code Saturne* , 3D : DOM + equivalent absorption coefficient, 1D : Broadband emissivity scheme

x and y directions. Staying the NBL often leads to reducing the height of computational domain to 1.0 km or 2.0 km, where the radiance is not equal to zero. Considering an isotropic radiance at the top of the domain is an approximation widely used in the IR domain (Garrott and Brost 1981; Siqueira and Katul 2010). Thus, $I^\downarrow(z_{\text{TOP}}) = F^\downarrow(z_{\text{TOP}}) / \pi$ where $F^\downarrow(z_{\text{TOP}})$ (see figure 1) is computed once at the beginning of the simulation.

In order to check the reliability of their approximation, we tested the boundary condition at the top of the domain height. The results in figure 4. show good agreements between the 3D resolution with different mesh heights and the 1D solution. Moreover, taking $T_g = T_A$ in (2.16) leads to $F^\uparrow(z) = \sigma T_A^4$. The values obtained for upward fluxes in *Code Saturne* with the 1D and 3D code are consistent with its analytical expression in an isothermal atmosphere with no temperature discontinuity between the ground and the air.

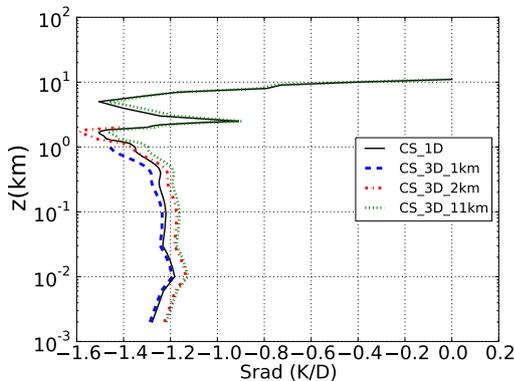


FIG. 4. Heating rate (K/Day) for three different mesh heights, $T_{\text{air}} = T_{\text{ground}} = 270\text{K}$, water vapor only, Semi-Analytic radiative source term

b. Simulations with IOP13 profiles

The atmospheric profiles from the 13th IOP 18/19-02-2007 were selected to test the radiative parametrization. The dataset contains a whole life cycle of radiative fog. Two cases were chosen from the data.

1) CLEAR SKY CONDITIONS

Due to the higher value of the ground emissivity, the temperature of the surface drops below the one of the air immediately above. This leads to a strong inversion of temperature (figure 5) in the lowest part of the atmosphere. As the cooling continues, the air reaches saturation conditions to allow water vapor condensation. So the cooling rate during the night in clear sky condition has to be computed as accurately as possible to allow the CFD model to produce liquid water.

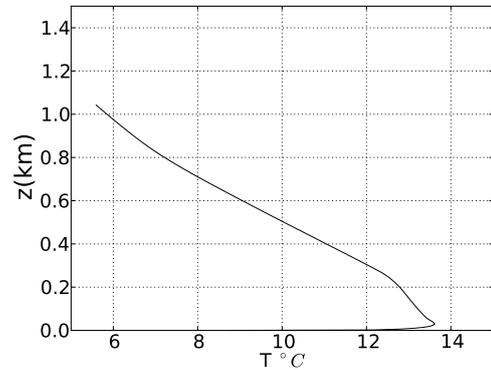


FIG. 5. Temperature profile at 6:00pm

Figure 6 plots the cooling rate for a domain height equal to 1km and 2km at 6:00 pm. The absorption coefficients were computed by using the total emissivity that takes into account water vapor, carbon dioxide and ozone (given in Appendix A).

Although this parametrization has been developed using analytical solutions in an isothermal atmosphere, it gives good results in this case. The small discrepancy between the 1-D broadband emissivity scheme and the DOM with equivalent absorption coefficient shows that the isothermal hypothesis in the expression of equivalent absorption coefficient has a weak influence.

2) FOGGY CONDITIONS

In order to simulate a few hours of fog formation in the nocturnal boundary layer, it is important to test the response of our radiative parametrization in the presence of cloud water droplets. As we said, scattering was left out in our equations but droplets means spherical particles and scattering. This process has been neglected for a long time

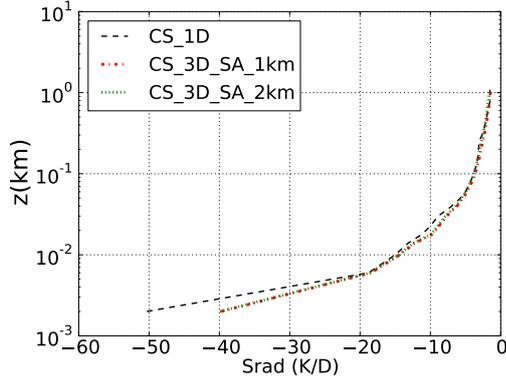


FIG. 6. Heating rate (K/Day), Semi-Analytic radiative source term, Atmospheric profiles from IOP13 data at 6:00pm; H_2O , CO_2 , O_3 and $(H_2O)_2$

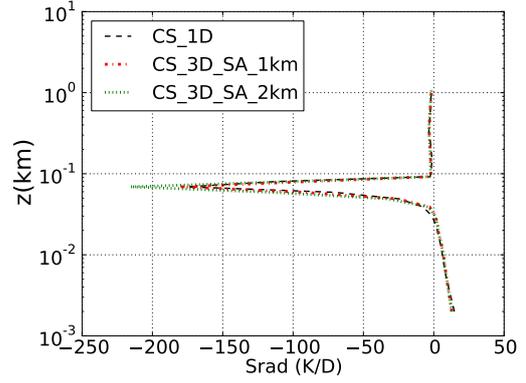


FIG. 7. Heating rate (K/Day), Semi-Analytic radiative source term, Atmospheric profiles from IOP13 data at 6:00pm; liquid water and H_2O , CO_2 , O_3 and $(H_2O)_2$

in longwave radiation. The first reason is that absorption is dominant and scattering is of secondary importance in LW radiation (Chou et al. 1999). The second reason is the computational time needed by the solver (DOM) for scattering. Not considering scattering in some application – retrieval of equivalent radius of clouds droplets (Dubuisson et al. 2005) – is an approximation which can lead to significant errors (Chou et al. 1999). However this radiative parametrization is adequate for applications where absorption is the dominant process.

The absorption through the cloud may be parameterized using the transmission through a layer containing gases and liquid water and is nothing else than the product of the gases transmission and the liquid water transmission.

$$\mathcal{T}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) = \mathcal{T}_g\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \mathcal{T}_{liq}\left(z', z, \frac{1}{\mu}\right) \quad (4.5)$$

The equivalent absorption coefficients keep the formulation (3.6) et (3.7). If the absorption coefficients are assumed horizontally constant, the distribution of liquid water is not. The problem is that the formulation (4.5) implies calculations for each atmospheric column containing liquid water. It is more convenient to separate the absorption caused by clouds droplets and gases. This leads to consider an equivalent equivalent absorption coefficient equal to the sum of gaseous equivalent absorption coefficient and liquid water absorption coefficient.

$$k^{\uparrow\downarrow} = x_v k_{liq} + (1 - x_v) k_g^{\uparrow\downarrow} \quad (4.6)$$

where $k_{liq} = \rho_l \kappa_l$ is the absorption coefficient for liquid water and x_v is the volumique fraction of liquid water in the cell. κ_l is the absorption cross section of clouds droplets which is commonly assumed constant in infrared domain and computed according to Stephens (1984).

The good agreement with the 1D radiative code illustrates the good behaviour of our longwave radiative

TABLE 1. Mean relative error value of incident flux on the surface Q_{inc} and mean relative error of cooling rate S_{rad} between 1-D and 3-D radiation code

Conditions+time	Domain height	$\Delta Q_{inc}\%$	$\Delta S_{rad}\%$
Isothermal $T_g = T_A$ $(H_2O)_v$ only 12:00 am	1km	0.5	3.3
	2km	0.5	2.9
	11km	6.0	4.0
Isothermal $T_g \neq T_A$ $(H_2O)_v$ only 12:00 am	1km	0.1	11.3
	2km	0.1	11.3
	11km	6.0	10.4
Isothermal $T_g \neq T_A$ $(H_2O)_v, (H_2O)_2, CO_2$ and O_3 12:00 am	1km	0.0	12.6
	2km	0.4	12.1
	11km	6.0	9.8
Clear sky 6:00 pm	1km	5.4	11.2
	2km	9.7	10.0
Clear sky 9:00 pm	1km	2.5	6.2
	2km	6.9	8.0
Foggy 12:00 pm	1km	4.8	14.1
	2km	7.7	11.4
Foggy 3:00 am	1km	0.8	24.8
	2km	0.9	26.2

parametrization in the presence of various gases and liquid water in a non isothermal atmosphere.

$$\Delta S_{rad} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{cel}} |S_{rad,k}^{3D} - S_{rad,k}^{1D}|}{\sum_{k=1}^{N_{cel}} |S_{rad,k}^{1D}|} \quad (4.7)$$

$$\Delta Q_{inc} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{fac}} |F_{3D,k}^{\downarrow}(0) - F_{1D,k}^{\downarrow}(0)|}{\sum_{k=1}^{N_{fac}} |F_{1D,k}^{\downarrow}(0)|} \quad (4.8)$$

The shape of the cooling rate and its highest value - around 200 K/Day - is the signature of a radiative fog. At the top of the fog layer we recover an extreme cooling value that allows fog development due to the destabilization of temperature profile in the fog layer. The warming of the air layer near the surface reflects the blackbody behaviour of the fog which keeps radiative energy from the upward fluxes into the air layer below the top of the fog. (4.7), (4.8) compute relative error values in table 1. Mostly, mean relative errors in the domain is around 10% for cooling rates and less than 5% for the incident flux on the surface. The more we reduce the domain height, the less is the discrepancy between the 1D and the 3D simulations. A reason may be that the boundary condition at the top of the 3-D simulated domain is given by the 1-D code ($F^\downarrow(z_{\text{TOP}})$). Another reason may be the mesh used in radiation fog code. It has to be very fine near the ground and coarse up to the first thousands meters. Reducing the domain height leads to keep the finest cells of mesh and may limit the false scattering induced by the upwind scheme - used for the spatial integration - (see Ferziger and Perić 2002, chap. 4). A different scheme to compute radiances on faces should be used like the one used in SHDOM (Evans 1998).

Conclusion and Perspectives

A new parametrization based on broadband emissivity scheme has been developed here for a 3D resolution of absorption in the Radiative Transfer Equation. This radiative property model is based on the mathematical calculations derived from the Cooling To Space approximation and proposes an alternative to narrow bands models. By distinguishing the upward and the downward directions, a pseudo two bands model was built. The distribution of gases in the atmosphere is assumed to horizontally uniform, so the absorption coefficients only depend on height (Evans 1998). The spectral representation of the upward and downward fluxes leads to consider two different equivalent absorption coefficients as suggested by Edwards (1996). Several tests with various meteorological conditions have been done to test the reliability of the parametrization. Under both clear sky with stable and unstable conditions and cloudy sky, coupling the DOM with the equivalent absorption parametrization gave good results on heating rates and fluxes in comparison with broadband emissivity scheme. The sensitivity study to the boundary condition at the top of the computed domain showed that it is possible to reduce the domain height to 1 or 2 km. This reduces the discrepancy between the 1-D and the 3-D simulations because the mesh is finer in the lowest part of the computational domain.

The diffuse approximation in optical path calculations limits the interest of angular integration. Ponnulakshmi

et al. (2012) proposed a formulation of directional emissivity. Here is the formulation of directional equivalent absorption coefficients for the discrete ordinates method:

$$k^\uparrow(z) = 1/\mu \frac{\partial \varepsilon^\uparrow}{\partial z}(0, z, 1/\mu) \frac{1}{[1 - \varepsilon^\uparrow(0, z, 1/\mu)]} \quad (4.9)$$

$$k^\downarrow(z) = -(1/\mu) \frac{\partial \varepsilon^\downarrow}{\partial z}(z, z+\infty, 1/\mu) \frac{1}{[1 - \varepsilon^\downarrow(z, +\infty, 1/\mu)]} \quad (4.10)$$

where $\varepsilon^\uparrow(z', z, 1/\mu)$ is defined with an optical path divided by μ :

$$\varepsilon : \left(z', z, \frac{1}{\mu} \right) \mapsto \frac{1}{\sigma T^4} \int_0^{+\infty} \left[1 - \mathcal{F}_\lambda \left(z, z', \frac{1}{\mu} \right) \right] \pi I_\lambda^o(z') d\lambda. \quad (4.11)$$

Thus allows to test the sensitivity to the quadrature scheme, i.e. the number of discrete directions.

This fast parametrization may be useful for a dynamical study to simulate 3-D radiative effects of complex terrain or vegetation in the NBL. With the correction of reflected flux on the surface, it is possible to compare data simulation from 1-D and 3-D radiation code with measurements from the PARISFog field experiment. This parametrization is independant from the emissivity function and may be tested with those of Zdunkowski and Johnson (1965) or Shaffer and Long (1975).

Acknowledgment. The research reported in this paper has been supported by the CERE, École des Ponts Paristech and EDF R&D. The authors are thankful to Pr Dubuisson for many valuable discussions; Dr. Ponnulakshmi and Pr. Subramanian for useful scientific litterature.

APPENDIX A

Broadband Emissivity Scheme Formula

Optical path

$$u_{H_2O}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{H_2O}(z'') \left(\frac{P(z'')}{P_0} \sqrt{\frac{T_0}{T(z'')}} \right)^n dz''$$

$$u_{CO_2}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{CO_2}(z'') \left(\frac{P(z'')}{P_0} \right)^{3/4} dz''$$

$$u_{O_3}(z', z) = |f_{\text{Green}}(z) - f_{\text{Green}}(z')|$$

$$u_{\text{dim}}(z', z) = \int_{z'}^z \rho_{H_2O}(z'') e(z'') f(T(z''), T_0) dz''.$$

where $f(T(z''), T_0) = \exp\left[1800\left(\frac{1}{T(z'')} - \frac{1}{296.0}\right)\right]$ and $f_{\text{Green}} = a \frac{1 + e^{-b/c}}{1 + e^{(z-b)/c}}$ with $a = 0.4 \text{ cmNTP}$, $b = 20 \text{ km}$, c chosen as $b/c = 5$ (Green 1964)

Emissivity functions

Sasamori (1968) formula for water vapor, carbon dioxide and ozone :

$$\varepsilon_{\text{H}_2\text{O}}(u_{\text{H}_2\text{O}}) = \begin{cases} 0.846 * (3.59 \times 10^{-5} + u_{\text{H}_2\text{O}}/10.)^{0.243} & \text{for } u_{\text{H}_2\text{O}} < 0.1 \text{ kg.m}^{-2} \\ 0.24 \log_{10} (0.01 + u_{\text{H}_2\text{O}}/10.) + 0.622 & \text{for } u_{\text{H}_2\text{O}} \geq 0.1 \text{ kg.m}^{-2} \end{cases}$$

$$\varepsilon_{\text{CO}_2}(u_{\text{CO}_2}) = \begin{cases} 0.0676 * (0.01022 + u_{\text{CO}_2})^{0.421} - 0.00982 & \text{for } u_{\text{CO}_2} < 1 \text{ cmNTP} \\ 0.24 \log_{10} (0.0676 + u_{\text{CO}_2}) + 0.622 & \text{for } u_{\text{CO}_2} \geq 1 \text{ cmNTP} \end{cases}$$

$$\varepsilon_{\text{O}_3}(u_{\text{O}_3}) = \begin{cases} 0.209(u_{\text{O}_3} + 7.0 \times 10^{-5})^{0.436} - 3.21 \times 10^{-3} & \text{for } u_{\text{O}_3} < 0.01 \text{ cmNTP} \\ 7.49 \times 10^{-2} + 2.12 \times 10^{-2} \log_{10} (u_{\text{O}_3}) & \text{for } u_{\text{O}_3} \geq 0.01 \text{ cmNTP} \end{cases}$$

$$T_{15\mu}(u_{\text{H}_2\text{O}}) = \begin{cases} 1.33 - 0.832(u_{\text{H}_2\text{O}}/10. + 0.0286)^{0.26} & \text{for } u_{\text{H}_2\text{O}} < 20 \text{ kg.m}^{-2} \\ 0.33 - 0.2754(\log_{10} (u_{\text{H}_2\text{O}}/10.) - 0.3011) & \text{for } u_{\text{H}_2\text{O}} \geq 20 \text{ kg.m}^{-2} \end{cases}$$

(Veyre et al. 1980) for water vapor dimer :

$$\varepsilon_{\text{dim}}(u_{\text{dim}}) = \begin{cases} 0.4614 \left[1 - \frac{\sum_{i=0}^2 a_i u_{\text{dim}}^i}{\sum_{j=0}^3 b_j u_{\text{dim}}^j} \right] & \text{for } u_{\text{dim}} \leq 0.5 \text{ g.cm}^{-2} \\ 0.4614 & \text{for } u_{\text{H}_2\text{O}} > 0.5 \text{ g.cm}^{-2} \end{cases}$$

with $a_0 = 0.015075$, $a_1 = -0.036185$, $a_2 = 0.0019245$, $b_0 = a_0$, $b_1 = 0.19547$, $b_2 = 0.75271$, $b_3 = 1$

$$T_w(u_{\text{H}_2\text{O}}) = \left(\sum_{i=0}^4 a'_i u_{\text{dim}}^i \right) / \left(\sum_{j=0}^5 b'_j u_{\text{dim}}^j \right)$$

with $a'_0 = 7.76192 \times 10^{-7}$, $a'_1 = 1.33836 \times 10^{-3}$, $a'_2 = 0.166649$, $a'_3 = 2.17686$, $a'_4 = 2.6902$, $b'_0 = 7.79097 \times 10^{-7}$, $b'_1 = 1.36832 \times 10^{-3}$, $b'_2 = 0.179601$, $b'_3 = 2.70573$, $b'_4 = 5.15119$, $b'_5 = 1$

References

- Archambeau, F., N. Méchitoua, and M. Sakiz, 2004: A finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows— industrial applications. *Int. J. Finite*, **1**, 1–62.
- Chandrasekhar, 1950: *Radiative transfer*. Oxford University Press.
- Chou, M. D., and A. Arking, 1980: Computation of infrared cooling rates in the water vapor bands. *J. Atmos. Sci.*, **37**, 855–867.
- Chou, M.-D., K.-T. Lee, S.-C. Tsay, and Q. Fu, 1999: Parameterization for cloud longwave scattering for use in atmospheric models. *J. Climate*, **12** (1), 159–169.
- Davis, A., and A. Marshak, 2004: *3D Radiative Transfer in Cloudy Atmospheres*. Springer, 153–242 pp.
- Davis, J. M., 1994: Methods of modeling radiant energy exchange in radiation fog and clouds. Tech. Rep. ARL-CR-103, Army Research Laboratory, 97 pp.
- Douce, A., and N. Méchitoua, 2004: Mise en oeuvre dans *code saturne* des modélisations des physiques particulières. tome 3 : Transfert thermique radiatif en milieux gris semi-transparents. Tech. Rep. HI-81/02/019/A, Électricité de France R&D, 52 pp.
- Dubuisson, P., V. Giraud, O. Chomette, H. Chepfer, and J. Pelon, 2005: Fast radiative transfer modeling for infrared imaging radiometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **95** (2), 201–220.
- Edwards, J. M., 1996: Efficient calculations of infrared fluxes and cooling rates using the two-stream equations. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 1921–1932.
- Edwards, J. M., 2009: Radiative processes in the stable boundary layer: Part i. radiative aspects. *Bound.-Layer. Meteor.*, **131**, 105–126.
- Ellingson, R. G., and Y. Fouquart, 1991: The intercomparison of radiation codes in climate models: An overview. *J. Geophys. Res.*, **96**, 8925–8927.
- Elsasser, W. M., 1942: *Heat transfer by infrared radiation in the atmosphere*. 6, Wiley Online Library.
- Evans, K. F., 1998: The spherical harmonics discrete ordinate method for three-dimensional atmospheric radiative transfer. *J. Atmos. Sci.*, **55** (3), 429–446.
- Ferziger, J. H., and M. Perić, 2002: *Computational methods for fluid dynamics*, Vol. 3. Springer Berlin.
- Fleck, J. A., 1961: The calculation of nonlinear radiation transport by a monte carlo method. Tech. rep., Lawrence Radiation Lab., Univ. of California, Livermore.
- Fu, Q., and K. N. Liou, 1992: On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, **49**, 2139–2156.
- Garratt, J. R., and R. A. Brost, 1981: Radiative cooling effects within and above the nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **38**, 273–2746.

- Goody, R. M., 1952: A statistical band model for water vapor. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **78**, 165–169.
- Green, A., 1964: Attenuation by ozone and the earth's albedo in the middle ultraviolet. *Appl. Opt.*, **3**, 203–208.
- Haefelin, M., and Coauthors, 2010: Parisfog : Shedding new light on fog physical processes. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **91**, 767–783.
- Hoch, S. W., C. D. Whiteman, and B. Mayer, 2011: A systematic study of longwave radiative heating and cooling within valleys and basins using a three-dimensional radiative transfer model. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, **50**, 2473–2489.
- Lacis, A. A., and V. Oinas, 1991: A description of the correlated k-distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres. *J. Geophys. Res.*, **96**, 9027–9063.
- Lenoble, J., 1993: *Atmospheric Radiative Transfer*. Hampton Series, Adarsh Deepak, 532 pp.
- Liou, K.-N., 2002: *An introduction to atmospheric radiation*, Vol. 84. Academic press.
- Malkmus, W., 1967: Random lorentz band model with exponential-tailed \mathcal{S}^{-1} line-intensity distribution function. *J. Opt. Soc. Amer.*, **57** (3), 323–329.
- Modest, M. F., 2003: *Radiative heat transfer*. Academic Press.
- Musson-Genon, L., 1987: Numerical simulations of a fog event with a one-dimensionnal boundary layer model. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 592–607.
- Ponnulakshmi, V. K., V. Mukund, D. K. Singh, K. R. Sreenivas, and G. Subramanian, 2012: Hypercooling in the nocturnal boundary layer: Broadband emissivity schemes. *J. Atmos. Sci.*, **69**, 2892–2905.
- Ponnulakshmi, V. K., V. Mukund, K. R. Sreenivas, and G. Subramanian, 2009: The ramdas layer remains a micro-meteorological problem. Tech. Rep. JNCASR/EMU/2009-1, Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, 41 pp.
- Rothman, L. S., and Coauthors, 1992: The hitran molecular database: Editions of 1991 and 1992. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **48** (5), 469–507.
- Sasamori, T., 1968: The radiative cooling calculation for application to general circulation experiments. *J. Appl. Meteor.*, **7**, 721–729.
- Savijärvi, H., 2006: Radiative and turbulent heating rates in the clear-air boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **132**, 147–161.
- Shaffer, W. A., and P. E. Long, 1975: *A predictive boundary layer model*. Techniques Development Laboratory, National Weather Service.
- Siqueira, M. B., and G. G. Katul, 2010: A sensitivity analysis of the nocturnal boundary-layer properties to atmospheric emissivity formulations. *Bound.-Layer Meteor.*, **134**, 223–242.
- Stephens, G. L., 1984: The parametrization of radiation for numerical weather prediction and climate models. *Mon. Wea. Rev.*, **12**, 826–866.
- Varghese, S., A. S. Vasudevamurthy, and R. Narasimha, 2003: A fast, accurate method of computing near surfaces longwave fluxes and cooling rates in the atmosphere. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 2869–2886.
- Veyre, P., G. Sommeria, and Y. Fouquart, 1980: Modélisation de l'effet des hétérogénéités du champ radiatif infra-rouge sur la dynamique des nuages. *J. Rech. Atmos.*, **14**, 89–108.
- Viskanta, R., R. W. Bergstrom, and R. O. Johnson, 1977: Radiative transfer in a polluted urban planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **34**, 1091–1103.
- Yamamoto, G., 1952: On a radiation chart. *Geophysic.*, **6**, 19–31.
- Zdunkowski, W. G., and F. G. Johnson, 1965: Infrared flux divergence calculations with newly constructed radiation tables. *Journal of Applied Meteorology*, **4** (3), 371–377.
- Zhang, X., L. Musson-Genon, B. Carissimo, M. Milliez, and E. Dupont, 2014: On the influence of a simple microphysics parametrization on radiation fog modelling: A case study during parisfog. *Bound.-Layer Meteor.*, **151**, 293–315.

Bibliographie

- Abramowitz, M., and I. A. Stegun, 1964 : *Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs, and mathematical tables*. 55, Courier Corporation.
- Archambeau, F., N. Méchitoua, and M. Sakiz, 2004 : A finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows—industrial applications. *Int. J. Finite*, **1**, 1–62.
- Arking, A., and K. Grossman, 1972 : The influence of line shape and band structure on temperatures in planetary atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, **29**, 937–949.
- Bouzereau, E., 2004 : Représentation des nuages chauds dans le modèle météorologique «mercure» : Application aux panaches d’aéroréfrigérants et aux précipitations orographiques. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
- Bresson, R., 2014 : Réalisation de maillages atmosphériques avec salome : Méthodologie et guide utilisateur. Tech. Rep. H-I88-2014-01474-FR, EDF R&D, 82 pp.
- Carlson, B. G., K. D. Lathrop, and Coauthors, 1965 : *Transport theory : the method of discrete ordinates*. Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California.
- CEA/DEN, E. R&D, and O. CASCADE, 2015 : Salomé platform. [Online ; accessed 23-March-2015], [http://http://www.salome-platform.org/](http://www.salome-platform.org/).
- Chai, J. C., H. S. Lee, and S. V. Patankar, 1993 : Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method. *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals*, **24** (4), 373–389.
- Chandrasekhar, 1950 : *Radiative transfer*. Oxford University Press.
- Chou, M. D., and A. Arking, 1980 : Computation of infrared cooling rates in the water vapor bands. *J. Atmos. Sci.*, **37**, 855–867.
- Chou, M.-D., K.-T. Lee, S.-C. Tsay, and Q. Fu, 1999 : Parameterization for cloud longwave scattering for use in atmospheric models. *J. Climate*, **12** (1), 159–169.
- Clarke, R. H., A. J. Dyer, and C. Scientific, 1971 : *The Wangara experiment : Boundary layer data*. CSIRO Australia.
- Coelho, P. J., 2002 : The role of ray effects and false scattering on the accuracy of the standard and modified discrete ordinates methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **73** (2), 231–238.

- Collin, A., 2003 : Simulation du transfert de chaleur au sein de pulvérisations gaz-gouttelettes soumises à une intense source radiative. Tech. rep., LEMTA - CNRS UMR 7563, 170 pp.
- Dall'Ozzo, C., 2013 : Modélisation d'écoulements atmosphériques stratifiés par large-eddy simulation à l'aide de code_saturne. Ph.D. thesis, Paris Est.
- Davis, A., and A. Marshak, 2005 : *3D radiative transfer in cloudy atmospheres*. Springer.
- Davis, J. M., 1994 : Methods of modeling radiant energy exchange in radiation fog and clouds. Tech. Rep. ARL-CR-103, Army Research Laboratory, 97 pp.
- Denison, M. K., and B. W. Webb, 1993 : A spectral line-based weighted-sum-of-gray-gases model for arbitrary rte solvers. *Journal of Heat Transfer*, **115** (4), 1004–1012.
- Domoto, G., 1974 : Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-gray gases : the inverse transmission function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **14** (9), 935–942.
- Douce, A., and N. Méchitoua, 2004 : Mise en oeuvre dans *code_saturne* des modélisations des physiques particulières. tome 3 : Transfert thermique radiatif en milieux gris semi-transparents. Tech. Rep. HI-81/02/019/A, Électricité de France R&D, 52 pp.
- Dubuisson, P., V. Giraud, O. Chomette, H. Chepfer, and J. Pelon, 2005 : Fast radiative transfer modeling for infrared imaging radiometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **95** (2), 201–220.
- Dufresne, J., R. Fournier, and J. Grandpeix, 1999 : Inverse gaussian k-distributions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **61** (4), 433–441.
- Duynkerke, P. G., 1991 : Radiation fog : A comparison of model simulation with detailed observations. *Monthly Weather Review*, **119** (2), 324–341.
- Edwards, D., 1965 : Absorption of radiation by carbon monoxide gas according to the exponential wide-band model. *Applied Optics*, **4** (10), 1352–1353.
- Edwards, J. M., 1996 : Efficient calculations of infrared fluxes and cooling rates using the two-stream equations. *J. Atmos. Sci.*, **53**, 1921–1932.
- Edwards, J. M., 2009 : Radiative processes in the stable boundary layer : Part i. radiative aspects. *Bound.-Layer. Meteor.*, **131**, 105–126.
- Elias, T., and Coauthors, 2009 : Particulate contribution to extinction of visible radiation : Pollution, haze, and fog. *Atmospheric Research*, **92** (4), 443–454.
- Ellingson, R. G., J. Ellis, and S. Fels, 1991 : The intercomparison of radiation codes used in climate models : Long wave results. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012)*, **96** (D5), 8929–8953.
- Ellingson, R. G., and Y. Fouquart, 1991 : The intercomparison of radiation codes in climate models : An overview. *J. Geophys. Res.*, **96**, 8925–8927.

- Elsasser, W. M., 1942 : *Heat transfer by infrared radiation in the atmosphere*. 6, Wiley Online Library.
- Evans, K. F., 1998 : The spherical harmonics discrete ordinate method for three-dimensional atmospheric radiative transfer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **55** (3), 429–446.
- Fiveland, W., 1984 : Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal of Heat Transfer*, **106** (4), 699–706.
- Fiveland, W., 1987 : Discrete ordinate methods for radiative heat transfer in isotropically and anisotropically scattering media. *Journal of Heat Transfer*, **109** (3), 809–812.
- Fleck, J. A., 1961 : The calculation of nonlinear radiation transport by a monte carlo method. Tech. rep., Lawrence Radiation Lab., Univ. of California, Livermore.
- Fu, Q., and K. N. Liou, 1992 : On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, **49**, 2139–2156.
- Garratt, J. R., and R. A. Brost, 1981 : Radiative cooling effects within and above the nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **38**, 273–2746.
- Gastellu-Etchegorry, J.-P., V. Demarez, V. Pinel, and F. Zagolski, 1996 : Modeling radiative transfer in heterogeneous 3-d vegetation canopies. *Remote sensing of environment*, **58** (2), 131–156.
- Gérardin, J., P. BOULET, P. RUYER, and N. SEILER, 2012 : Évaluation du transfert radiatif dans un cœur de réacteur à eau pressurisée (rep) lors de la phase de renouveau d'un accident de perte de réfrigérant primaire (aprp). Ph.D. thesis, Université de Lorraine.
- Goody, R. M., 1952 : A statistical band model for water vapor. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **78**, 165–169.
- Green, A., 1964 : Attenuation by ozone and the earth's albedo in the middle ultraviolet. *Appl. Opt.*, **3**, 203–208.
- Haefelin, M., and Coauthors, 2005 : Sirta, a ground-based atmospheric observatory for cloud and aerosol research. *Annales Geophysicae*, Vol. 23, 253–275.
- Haefelin, M., and Coauthors, 2010 : Parisfog : Shedding new light on fog physical processes. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, **91**, 767–783.
- Hoch, S. W., C. D. Whiteman, and B. Mayer, 2011 : A systematic study of longwave radiative heating and cooling within valleys and basins using a three-dimensional radiative transfer model. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, **50**, 2473–2489.
- Hogan, R. J., 2010 : The full-spectrum correlated-k method for longwave atmospheric radiative transfer using an effective planck function. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **67** (6), 2086–2100.

- Hottel, H. C., and A. F. Sarofim, 1967 : *Radiative transfer*. McGraw-Hill.
- Hunter, B., and Z. Guo, 2015 : Numerical smearing, ray effect, and angular false scattering in radiation transfer computation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **81**, 63–74.
- Joseph, D., 2004 : Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels. Ph.D. thesis, Toulouse, INPT.
- Koch, R., and R. Becker, 2004 : Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **84** (4), 423–435.
- Koch, R., W. Krebs, S. Wittig, and R. Viskanta, 1995 : Discrete ordinates quadrature schemes for multidimensional radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **53** (4), 353–372.
- Lacis, A. A., and V. Oinas, 1991 : A description of the correlated k-distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres. *J. Geophys. Res.*, **96**, 9027–9063.
- Lebedev, V. I., 1976 : Quadratures on a sphere. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, **16** (2), 10–24.
- Lenoble, J., 1993 : *Atmospheric Radiative Transfer*. Hampton Series, Adarsh Deepak, 532 pp.
- Liou, K., 1992 : *Radiation and cloud processes in the atmosphere : theory, observation, and modeling*. 20, New York [etc.] : Oxford University Press.
- Liou, K.-N., 2002 : *An introduction to atmospheric radiation*, Vol. 84. Academic press.
- Lockwood, F., and N. Shah, 1981 : A new radiation solution method for incorporation in general combustion prediction procedures. *Symposium (international) on combustion*, Elsevier, Vol. 18, 1405–1414.
- Malalasekera, W., and E. James, 1996 : Radiative heat transfer calculations in three-dimensional complex geometries. *Journal of heat transfer*, **118** (1), 225–228.
- Malkmus, W., 1967 : Random lorentz band model with exponential-tailed s^{-1} line-intensity distribution function. *JOSA*, **57** (3), 323–329.
- Mallet, V., and Coauthors, 2007 : Technical Note : The air quality modeling system Polyphemus. *Atmos. Chem. Phys.*, **7** (20), 5,479–5,487.
- Marchuk, G. I., G. A. Mikhailov, R. A. Darbinjan, B. S. Elepov, M. A. Nazaraliev, and B. A. Kargin, 1980 : *The Monte Carlo methods in atmospheric optics*. Springer.
- Martin, A., 1992 : Modélisation du couplage rayonnement-convection appliqué aux flammes de diffusion de type industriel. Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris 6.

- Mellor, G. L., 1977 : The gaussian cloud model relations. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **34** (2), 356–358.
- Metropolis, N., and S. Ulam, 1949 : The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, **44** (247), 335–341.
- Milliez, M., 2006 : Modélisation micro-météorologique en milieu urbain : dispersion des polluants et prise en compte des effets radiatifs. Ph.D. thesis, Ecole des Ponts ParisTech.
- Mlawer, E. J., S. J. Taubman, P. D. Brown, M. J. Iacono, and S. A. Clough, 1997 : Radiative transfer for inhomogeneous atmospheres : Rrtm, a validated correlated-k model for the longwave. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012)*, **102** (D14), 16 663–16 682.
- Modest, M. F., 2003 : *Radiative heat transfer*. Academic Press.
- Modest, M. F., and H. Zhang, 2002 : The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures. *Journal of heat transfer*, **124** (1), 30–38.
- Möller, F., 1943 : Das strahlungsdiagramm. Reichsamt für Wetterdienst.
- Morcrette, J., H. Barker, J. Cole, M. Iacono, and R. Pincus, 2008 : Impact of a new radiation package, mcrad, in the ecmwf integrated forecasting system. *Monthly Weather Review*, **136** (12), 4773–4798.
- Musson-Genon, L., 1987 : Numerical simulations of a fog event with a one-dimensional boundary layer model. *Mon. Wea. Rev.*, **115**, 592–607.
- Musson-Genon, L., 1995 : Comparison of different simple turbulence closures with a one-dimensional boundary layer model. *Monthly weather review*, **123** (1), 163–180.
- Oreopoulos, L., and E. Mlawer, 2010 : Modeling : The continual intercomparison of radiation codes (circ) assessing anew the quality of gcm radiation algorithms. *Bulletin of the American Meteorological Society*, **91** (3), 305–310.
- Penner, S. S., 1959 : *Quantitative molecular spectroscopy and gas emissivities*, Vol. 12. Addison-Wesley Reading, Mass.
- PIELKE, R., 1984 : Mesoscale meteorological modeling((book)). *Research supported by NSF. Orlando, FL, Academic Press, 1984, 623.*
- Ponnulakshmi, V. K., 2014 : The role of radiation in the nocturnal boundary layer : the origin of the lifted temperature minimum. Ph.D. thesis, Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research - Engineering Mechanics Unit.
- Ponnulakshmi, V. K., V. Mukund, D. K. Singh, K. R. Sreenivas, and G. Subramanian, 2012 : Hypercooling in the nocturnal boundary layer : Broadband emissivity schemes. *J. Atmos. Sci.*, **69**, 2892–2905.

- Ponnulakshmi, V. K., V. Mukund, K. R. Sreenivas, and G. Subramanian, 2009 : The ramdas layer remains a micro-meteorological problem. Tech. Rep. JNCASR/EMU/2009-1, Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research, 41 pp.
- Qu, Y., 2011 : Three-dimensional modeling of radiative and convective exchanges in the urban atmosphere. Ph.D. thesis, Paris Est.
- Raithby, G., and E. Chui, 1990 : A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer*, **112** (2), 415–423.
- Rodgers, C., and C. Walshaw, 1966 : The computation of infra-red cooling rate in planetary atmospheres. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **92** (391), 67–92.
- Roger, M., 2006 : Modèles de sensibilité dans le cadre de la méthode de monte-carlo : illustrations en transfert radiatif. Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse.
- Rothman, L., and Coauthors, 2010 : Hitemp, the high-temperature molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **111** (15), 2139–2150.
- Rothman, L. S., and Coauthors, 1992 : The hitran molecular database : Editions of 1991 and 1992. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **48** (5), 469–507.
- Rothman, L. S., and Coauthors, 2009 : The hitran 2008 molecular spectroscopic database. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **110** (9), 533–572.
- Rukolaine, S., and V. Yuferev, 2001 : Discrete ordinates quadrature schemes based on the angular interpolation of radiation intensity. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **69** (3), 257–275.
- Sakami, M., A. Charette, and V. Le Dez, 1998 : Radiative heat transfer in three-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **59** (1), 117–136.
- Sasamori, T., 1968 : The radiative cooling calculation for application to general circulation experiments. *J. Appl. Meteor.*, **7**, 721–729.
- Savijärvi, H., 1990 : Fast radiative parametrization schemes for mesoscale and short-range forecast models. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, **29**, 437–447.
- Selçuk, N., 1985 : Exact solutions for radiative heat transfer in box-shaped furnaces. *Journal of heat transfer*, **107** (3), 648–655.
- Selçuk, N., and N. Kayakol, 1997 : Evaluation of discrete ordinates method for radiative transfer in rectangular furnaces. *International journal of heat and mass transfer*, **40** (2), 213–222.

- Selçuk, N., and Z. Tahiroglu, 1988 : Exact numerical solutions for radiative heat transfer in cylindrical furnaces. *International journal for numerical methods in engineering*, **26** (5), 1201–1212.
- Shaffer, W. A., and P. E. Long, 1975 : *A predictive boundary layer model*. Techniques Development Laboratory, National Weather Service.
- Siqueira, M. B., and G. G. Katul, 2010 : A sensitivity analysis of the nocturnal boundary-layer properties to atmospheric emissivity formulations. *Bound.-Layer. Meteor.*, **134**, 223–242.
- Sommeria, G., and J. Deardorff, 1977 : Subgrid-scale condensation in models of nonprecipitating clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **34** (2), 344–355.
- Soufiani, A., and J. Taine, 1997 : High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for h_2o , co_2 and co , and correlated-k model for h_2o and co_2 . *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **40** (4), 987–991.
- Stephens, G. L., 1984 : The parametrization of radiation for numerical weather prediction and climate models. *Mon. Wea. Rev.*, **12**, 826–866.
- Stull, R. B., 1988 : *An introduction to boundary layer meteorology*, Vol. 13. Springer.
- Tardif, R., 2007 : The impact of vertical resolution in the explicit numerical forecasting of radiation fog : A case study. *Pure and Applied Geophysics*, **164** (6-7), 1221–1240.
- Tessé, L., and J.-M. Lamet, 2011 : Radiative transfer modeling developed at onera for numerical simulations of reactive flows. *AerospaceLab Journal*, **Issue 2 (AL02-05)**.
- Thurgood, C., A. Pollard, and H. Becker, 1995 : The t_n quadrature set for the discrete ordinates method. *Journal of heat transfer*, **117** (4), 1068–1070.
- Truelove, J., 1988 : Three-dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering media using the discrete-ordinates approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **39** (1), 27–31.
- Varghese, S., A. S. Vasudevamurthy, and R. Narasimha, 2003 : A fast, accurate method of computing near surfaces longwave fluxes and cooling rates in the atmosphere. *J. Atmos. Sci.*, **60**, 2869–2886.
- Veyre, P., G. Sommeria, and Y. Fouquart, 1980 : Modélisation de l'effet des hétérogénéités du champ radiatif infra-rouge sur la dynamique des nuages. *J. Rech. Atmos.*, **14**, 89–108.
- Wessels, H. R. A., 1984 : Cabauw meteorological data tapes 1973-1984 ; description of instrumentation and data processing for the continuous measurements. Tech. Rep. W.R. 84-6 (FM), Royal Netherlands Meteorological Society.
- Yamamoto, G., 1952 : On a radiation chart. *Geophysic.*, **6**, 19–31.

- Zaïdi, H., E. Dupont, M. Milliez, L. Musson-Genon, and B. Carissimo, 2013 : Numerical simulations of the microscale heterogeneities of turbulence observed on a complex site. *Boundary-layer meteorology*, **147** (2), 237–259.
- Zdunkowski, W. G., and F. G. Johnson, 1965 : Infrared flux divergence calculations with newly constructed radiation tables. *Journal of Applied Meteorology*, **4** (3), 371–377.
- Zhang, X., 2011 : Modélisation du brouillard durant la campagne parisfog : approche prédictive et étude de l'effet des hétérogénéités spatiales. Ph.D. thesis, Université Joseph Fourier.
- Zhang, X., L. Musson-Genon, B. Carissimo, M. Milliez, and E. Dupont, 2014 : On the influence of a simple microphysics parametrization on radiation fog modelling : A case study during parisfog. *Bound.-Layer. Meteor.*, **151**, 293–315.