

Modélisation numérique du couplage météorologie-chimie atmosphérique

Virginie Marécal

Equipe de modélisation meso-échelle
(V. Marécal, M. Pirre, J. Arteta, J.M. Henriot)

Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement et de
l'Espace



CNRS- Univ Orléans



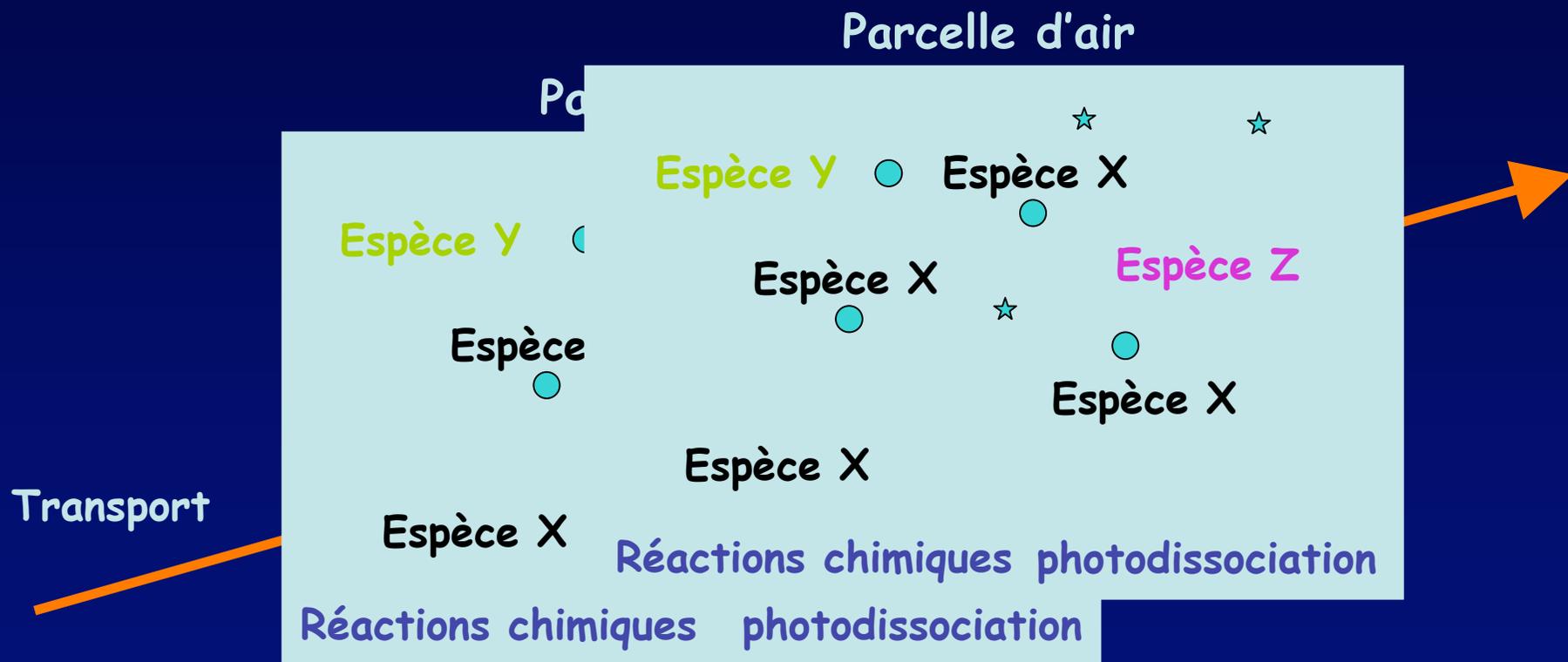
PLAN

1. Généralités sur les modèles de chimie atmosphérique
2. Le modèle Chemistry-CATT-BRAMS
 - Sa physique et sa chimie
 - Ses caractéristiques numériques et plateformes de calcul
3. Modélisation de l'impact de la convection tropicale sur la composition de l'atmosphère
4. Conclusions

Partie 1

Généralités sur les modèles de chimie atmosphérique

LA MODELISATION DE LA CHIMIE ATMOSPHERIQUE



LES DIFFERENTS TYPES DE MODELES

TRANSPORT (dynamique)

"Off-line": à partir
d'un autre modèle

ou

"On-line": calculé dans
le modèle lui-même

+

CHIMIE

Chimie gazeuse

Chimie hétérogène
(gaz-eau liquide/glace)

Photochimie

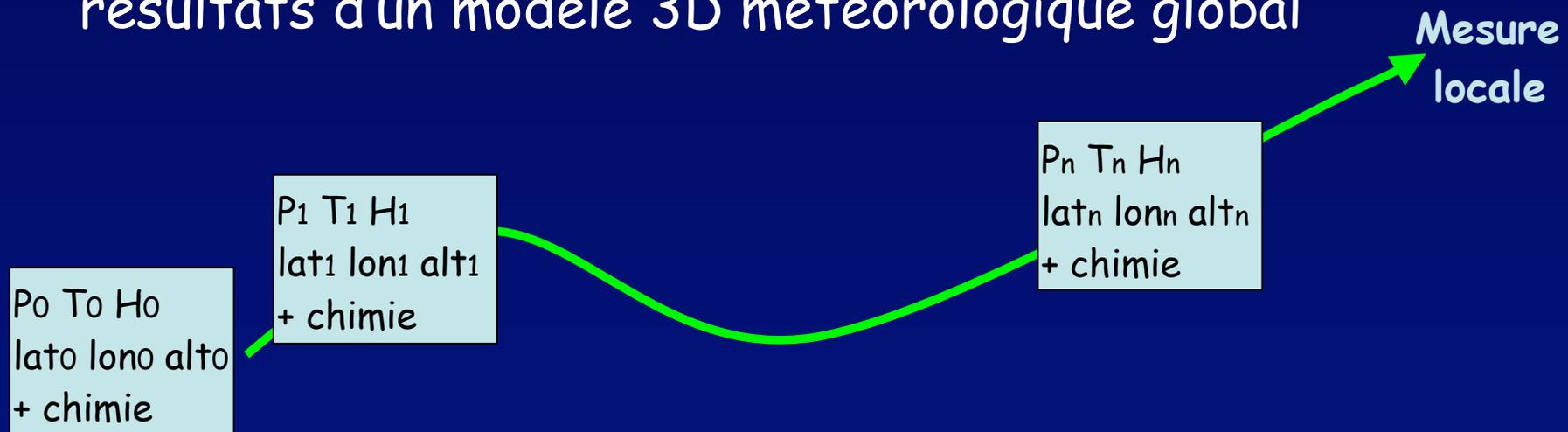
Sources (émissions)

LA PRISE EN COMPTE DU TRANSPORT (1)

Dynamique off-line (lagrangien)

Objectif: Interpretation de mesures locales

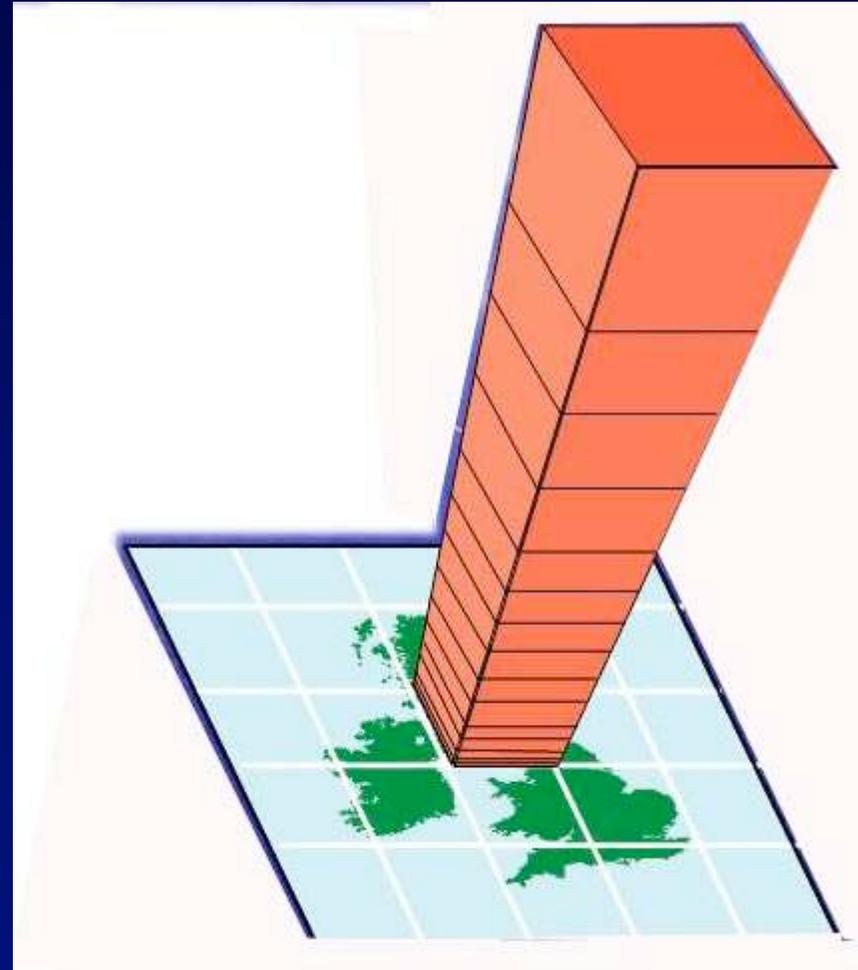
Les modèles lagrangiens comme MIPLASMO utilisent pression, température et humidité le long de trajectoires (latitude, longitude, altitude) calculées à partir des résultats d'un modèle 3D météorologique global



LA PRISE EN COMPTE DU TRANSPORT (2)

Dynamique off-line (3D)

Objectif: Etude de la chimie atmosphérique à l'échelle globale, interprétation de mesures locales et globales
Les modèles 3D de chimie-transport comme REPROBUS ou MOCAGE utilisent vent, pression, température et humidité interpolés à partir des résultats d'un modèle 3D météorologique global



LA PRISE EN COMPTE DU TRANSPORT (3)

Dynamique on-line: modèle 3D (grille cartésienne)

Les modèles 3D de chimie-climat (ex: LMDz)

- **Objectif:** Etude climatologique (au moins plusieurs années) de la chimie atmosphérique à l'échelle globale

- Résolution de la dynamique, travaillent sur des longues échelles temporelles le forçage étant donné par les scénarios d'évolution des composés chimiques (CO₂)

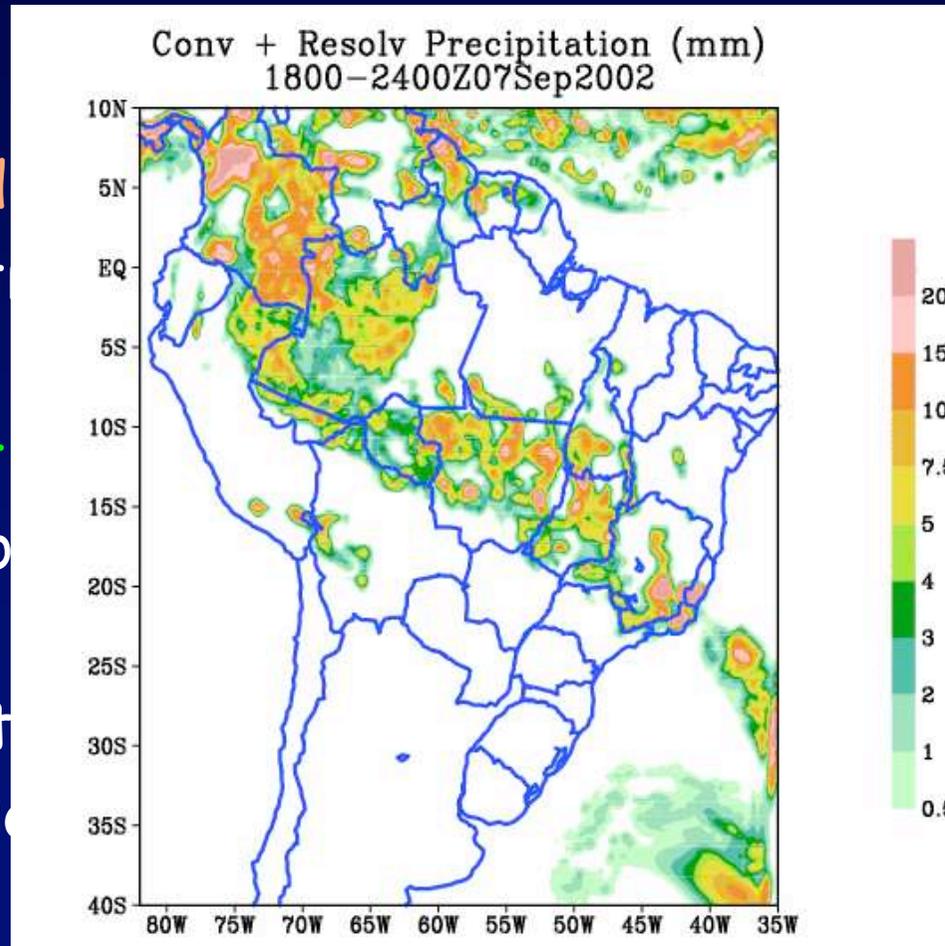
LA PRISE EN COMPTE DU TRANSPORT (4)

Dynamique on-line: modèle 3D (grille cartésienne)

Les mod
Chemist

-Object
météoro

-Résolut
limité, s



tée) (ex:

couplage

qs jours à 1-2 mois

omaine géographique
te

Partie 2

Le modèle Chemistry-CATT-BRAMS

- Sa physique et sa chimie
- Ses caractéristiques numériques et plateformes de calcul

GENERALITES

Collaboration LPCE/CPTEC

Remplacement de l'ancien modèle RAMS-Chimie:

- flexibilité schéma chimique en phase gazeuse
- optimisation numérique

Modèle
météorologique
BRAMS

(CPTEC, Univ.
Colorado)

+

Module de transport
des espèces chimiques
CATT-BRAMS

+

Module de chimie
Chemistry-CATT-BRAMS

LE MODELE METEOROLOGIQUE BRAMS

BRAMS

Conditions initiales et aux limites (P, T, H, vent) issues d'un modèle global (ECMWF)

Équations décrivant l'évolution temporelle des 3 composantes du vent, de la pression, de la température, de l'eau (vapeur, liquide, glace)

Paramétrisations

- processus radiatifs
- Convection
- Turbulence

P, T, H, vent nuage
Précipitations en chaque point de grille à chaque pas de temps

LE MODELE DE TRANSPORT CATT-BRAMS

CATT-BRAMS

Conditions initiales et aux limites pour les espèces chimiques (climato.,

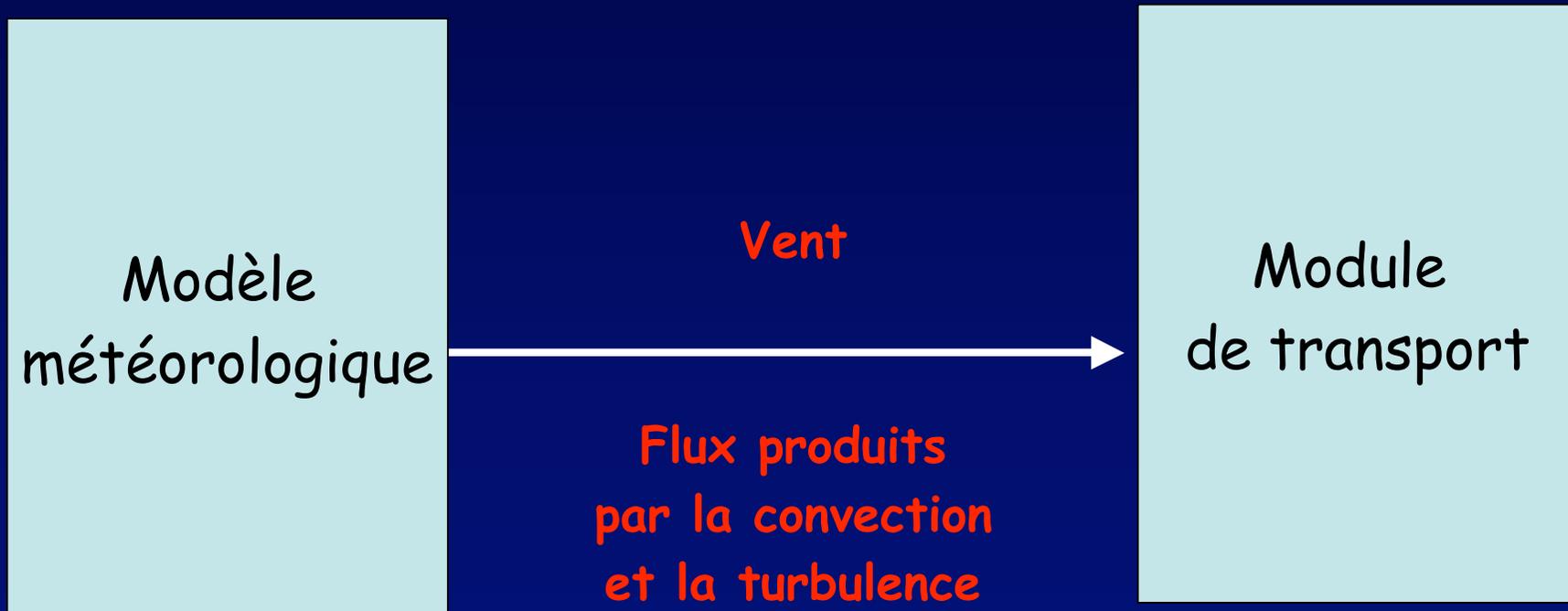
Sources d'émission naturelles, feux de biomasse et anthropiques

Équations décrivant l'évolution temporelle des espèces chimiques liée aux processus de transport

- Advection
- Convection
- Turbulence

Concentration des espèces chimiques en chaque point de grille à chaque pas de temps

LE COUPLAGE METEEO- TRANSPORT



LA PARTIE CHIMIE DU Chemistry-CATT-BRAMS

Module de chimie

Conditions
initiales et
aux limites
pour les
espèces
(climato.,
MOCAGE)

Sources
d'émission
naturelles,
feux de
biomasse et
anthropiques

Réactions gazeuses
(inc. Photodissociation)
(RACM 77 Esp, 237 R)
(CB 36 Esp, 100 R)

Réactions hétérogènes

Dépôt sec
Lessivage
Production de NO_x par
les éclairs

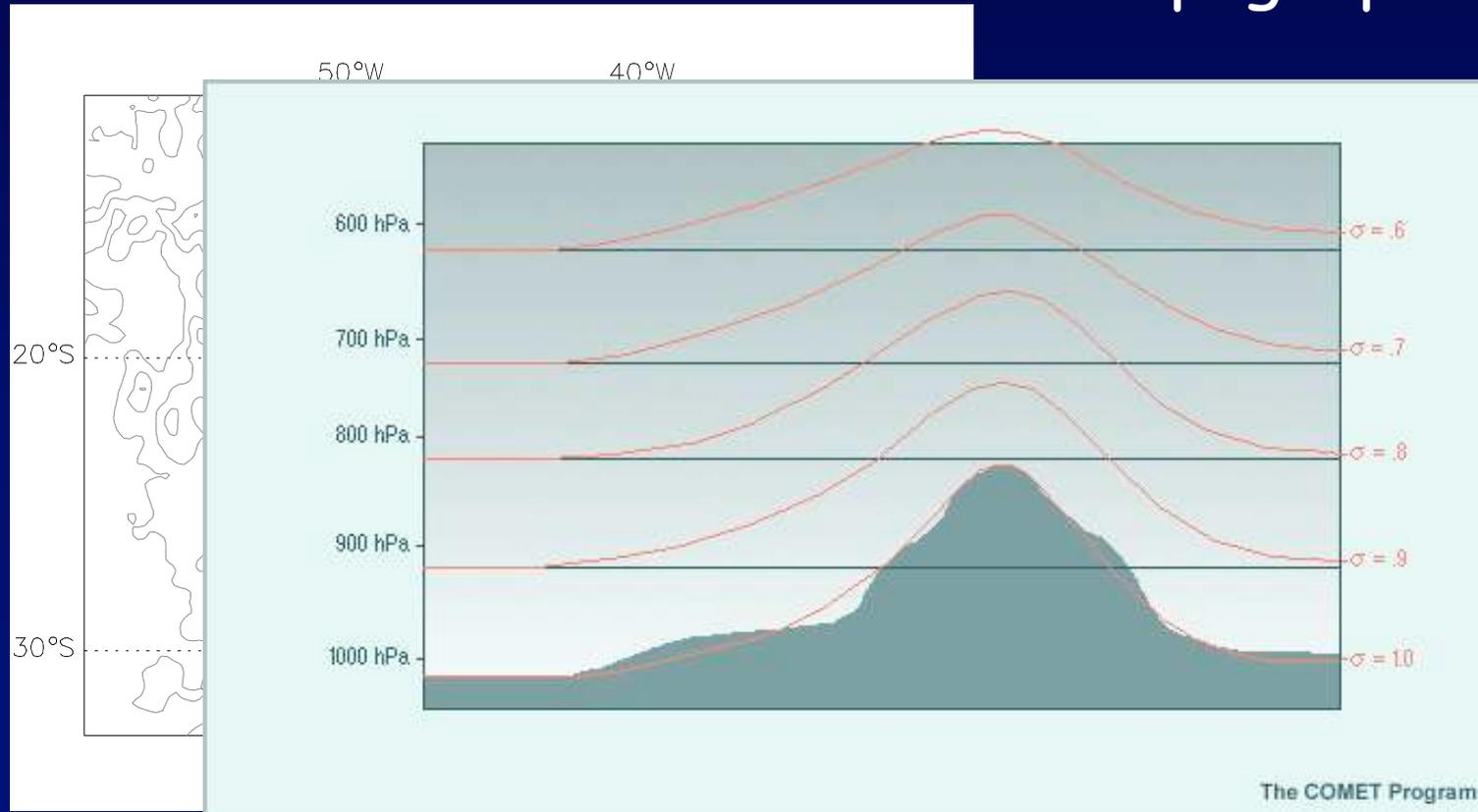
Concentration
des espèces,
taux de
prod/perte
en chaque
point de grille
à chaque pas
de temps

LE COUPLAGE METEEO-CHIMIE



GRILLES ET DOMAINES DU MODELE

- Grille horizontale: qqs m à qqs 100km
- Grille verticale étirée suivant la topographie



CARACTERISTIQUES NUMERIQUES

- Modèle en fortran 90
- Modèle parallélisé en MPI (Message Passing Interface):
 - pas de routines physiques/numériques globales : opérateurs en différence finie locaux
 - un sous-domaine (ensemble rectangulaire de points) exécuté sur chaque processeur, avec une décomposition du domaine adéquate pour le passage des messages.
 - A chaque pas de temps, les nœuds échangent l'information avec les limites du sous-domaine. les bibliothèques de passage des messages sont écrites en langage C, interfacées avec des routines également programmées en C.
- Modèle efficace: le BRAMS est optimisé pour une utilisation opérationnelle.

FLEXIBILITE DU SCHEMA REACTIONNEL EN PHASE GAZEUSE

Pré-processeur SPACK (CEREA)

On lui donne

- les espèces chimiques choisies, leurs caractéristiques (masse molaire, dépôt sec, solubilité....)
- Les réactions chimiques correspondant au schéma en phase gazeuse choisi

Il fournit

- Le code en fortran 90 directement utilisable dans le Chemistry-CATT-BRAMS nécessaire pour calculer la chimie en phase gazeuse (source/puit, solveur)

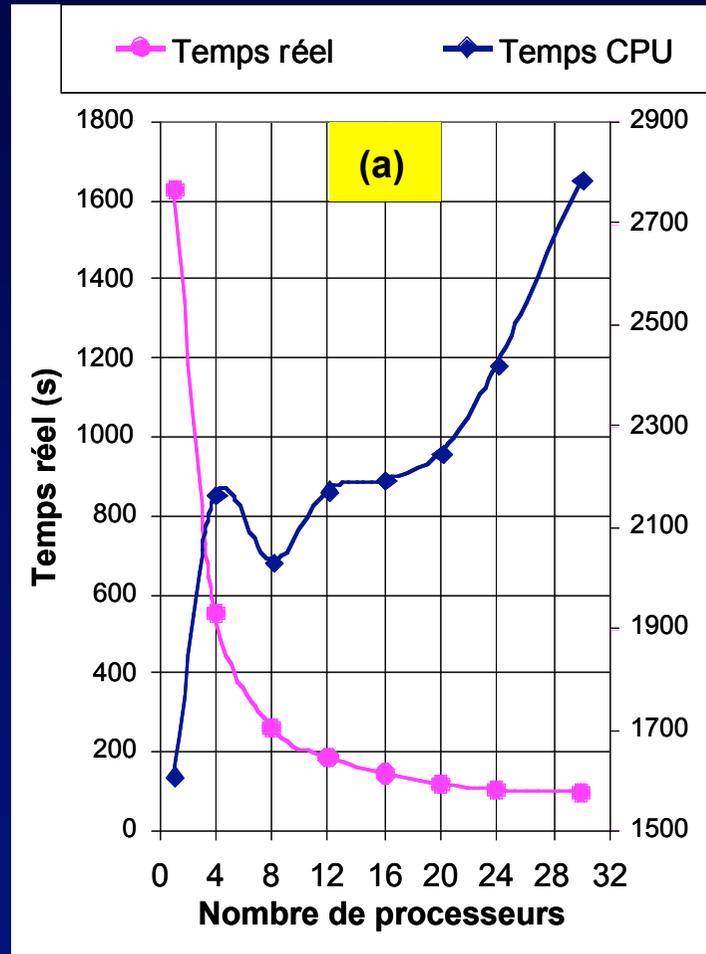
UTILISATION SUR DIFFERENTES PLATEFORMES

- PC linux bi-processeur
- SGI, IBM power4 au CINES
pour une grille 136x145x38
 - Performances sans chimie : 30 min pour 1 heure simulée
 - Performances avec chimie: 300 min CPU pour 1 heure simulée avec RACM (77 espèces)
- IBM power5 au Crihan: gain d'un facteur 2 environ
- CONDOR-CASCIMODOT (mémoire distribuée): chaque PC joue le rôle d'un coeur

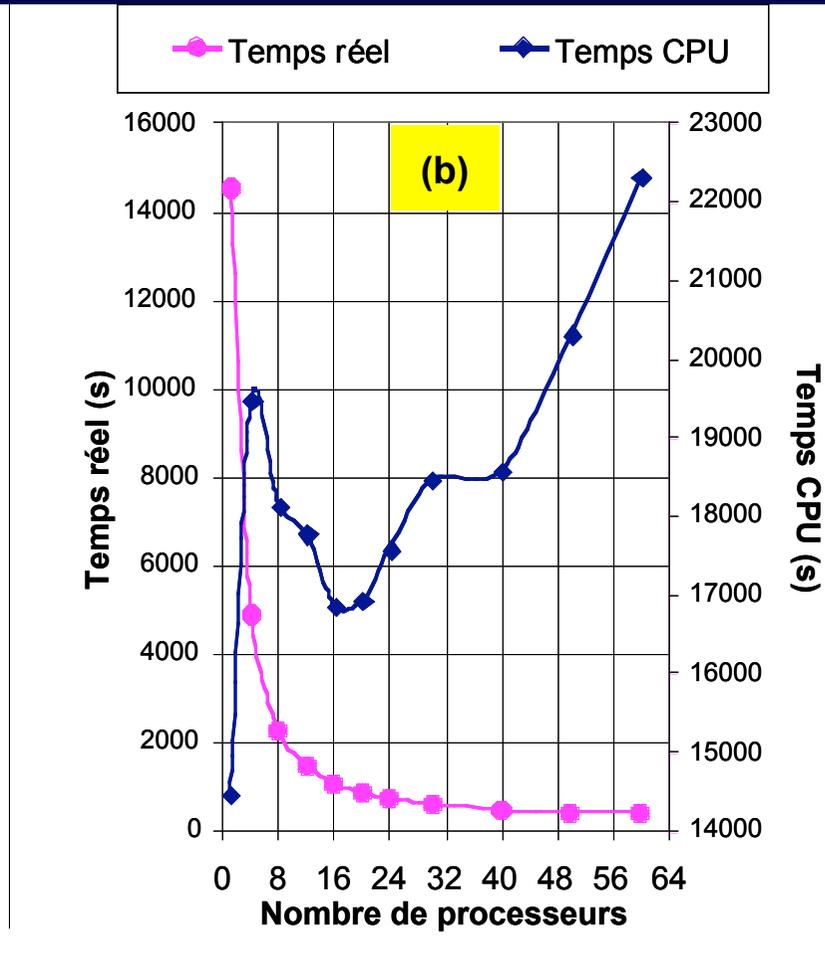
UTILISATION SUR DE NOUVELLES PLATEFORMES

- CCSC: Centre de Calcul Scientifique en Région Centre : 42 quadri-coeurs, Linux
- Nouvelle machine SGI du CINES, système Linux, 12288 coeurs, 30 Go par noeud

CALCULS SUR PLUSIEURS PROCESSEURS



SIMULATION SANS CHIMIE

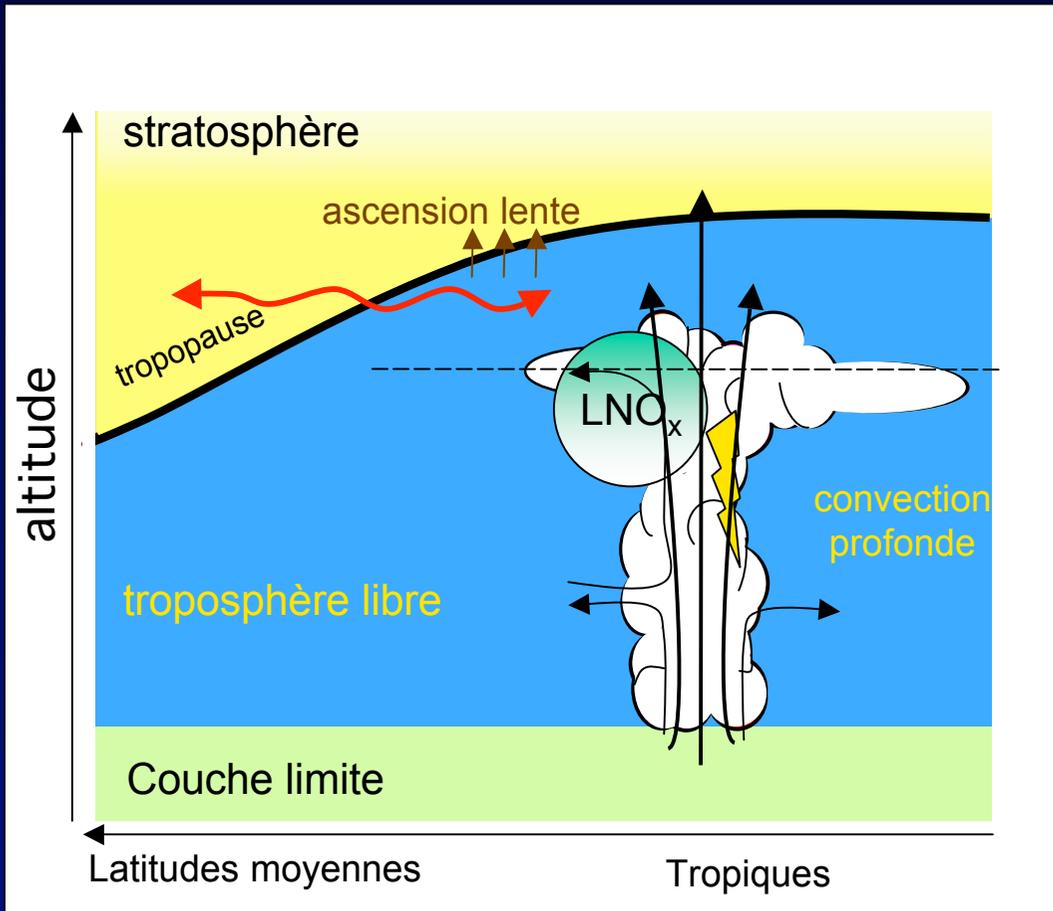


SIMULATION AVEC CHIMIE

Partie 3

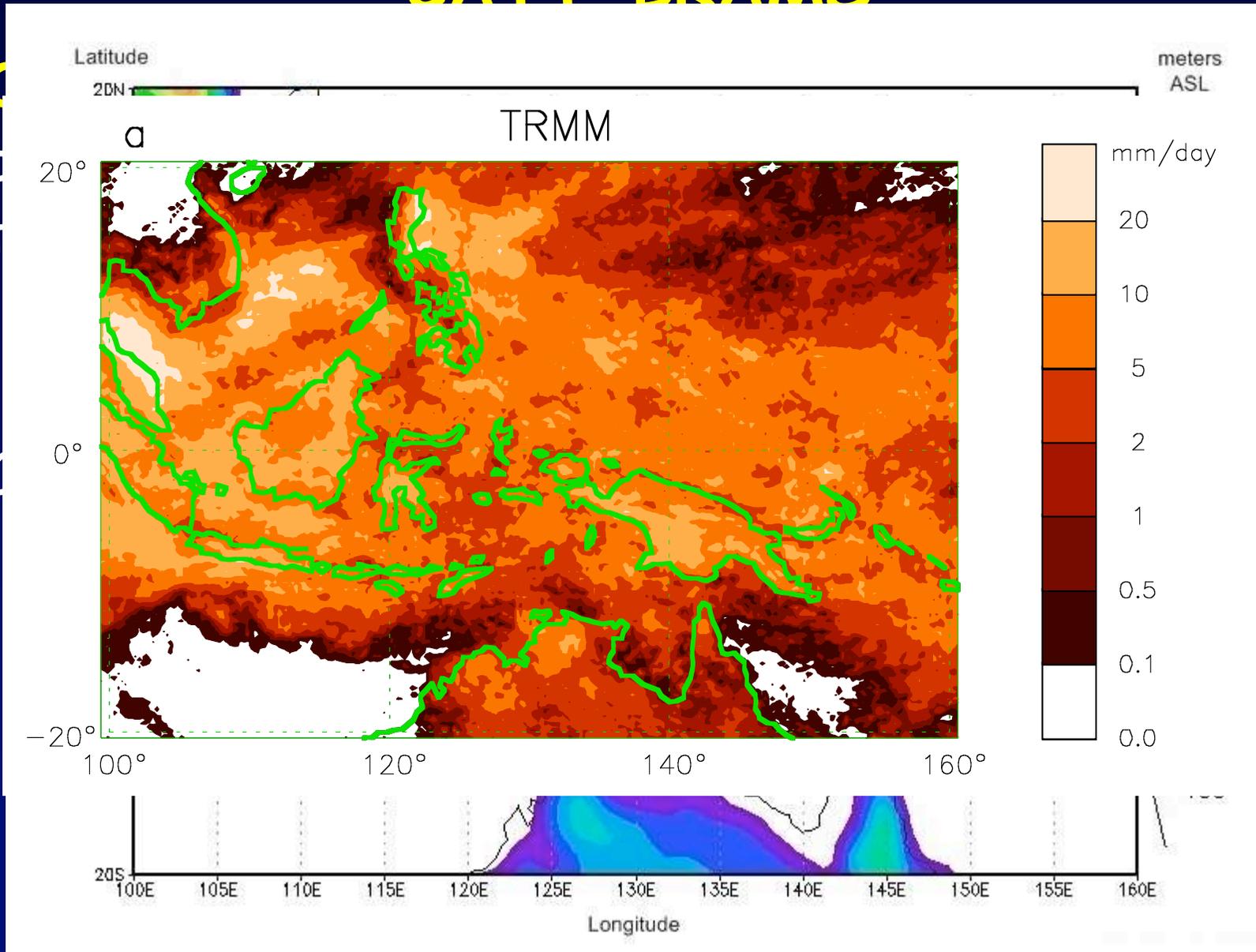
**Modélisation de l'impact de la
convection tropicale sur la
composition de l'atmosphère**

OBJECTIFS SCIENTIFIQUES DES TRAVAUX MENES AU LPCE



- Impact de la convection tropicale sur la composition chimique (y compris la vapeur d'eau) de la haute troposphère et de la basse stratosphère

Simulations régionales longues avec le CATT-BRAMS

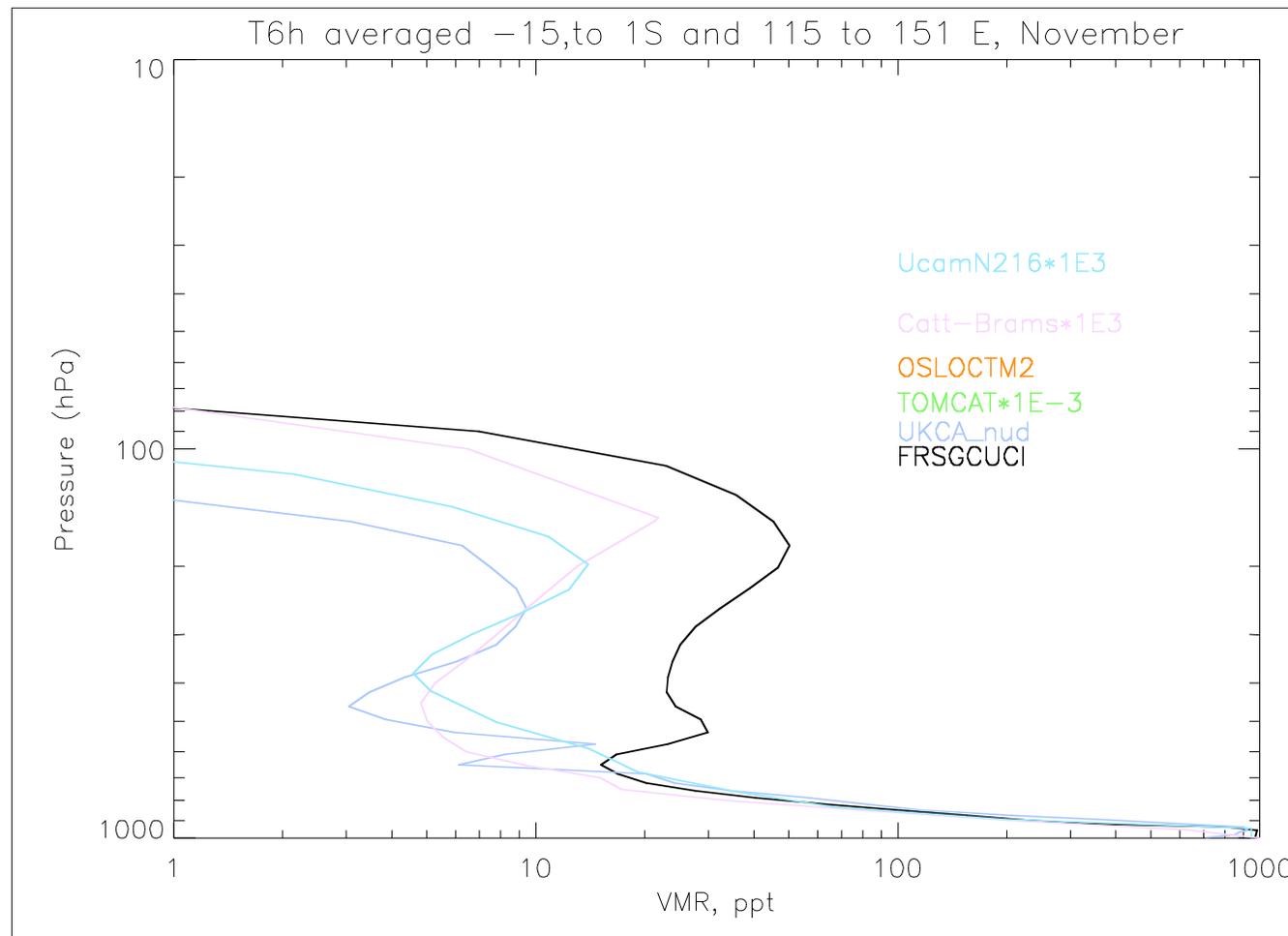


rt

et

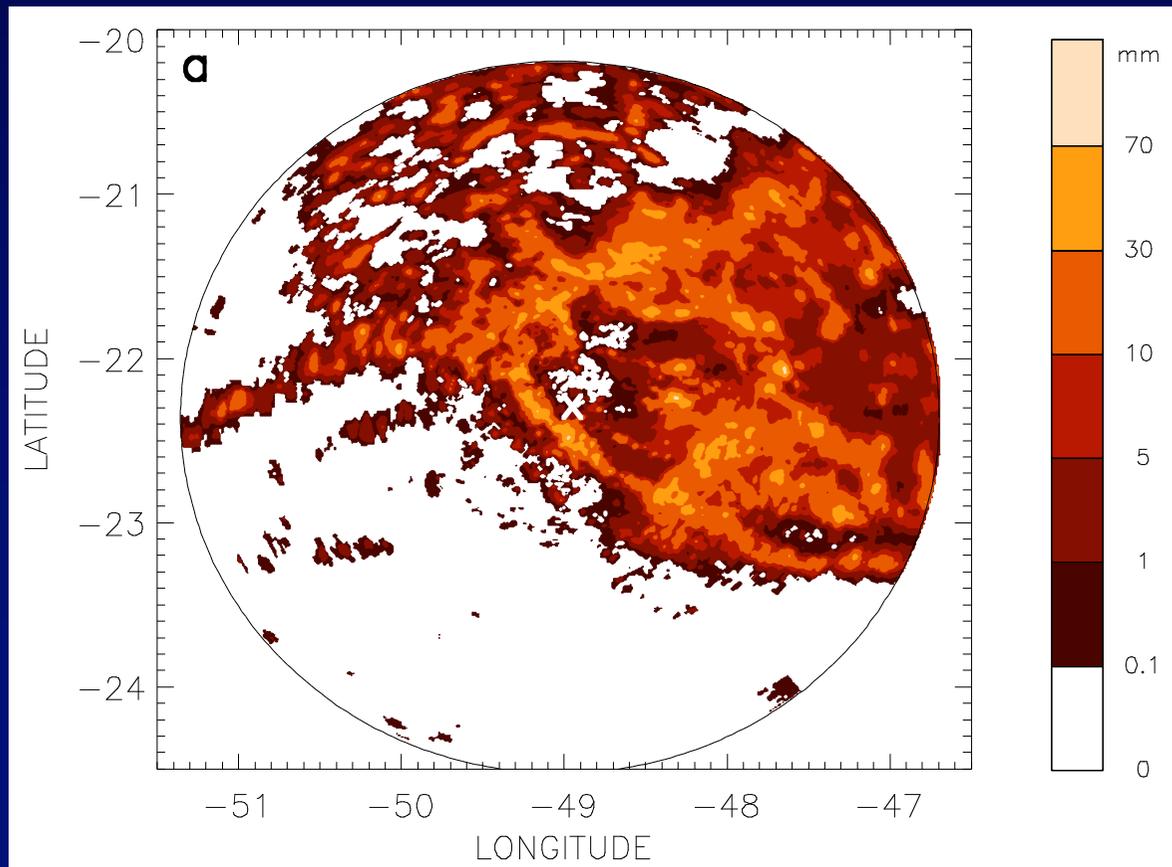
25

Résultats de la comparaison avec les modèles globaux



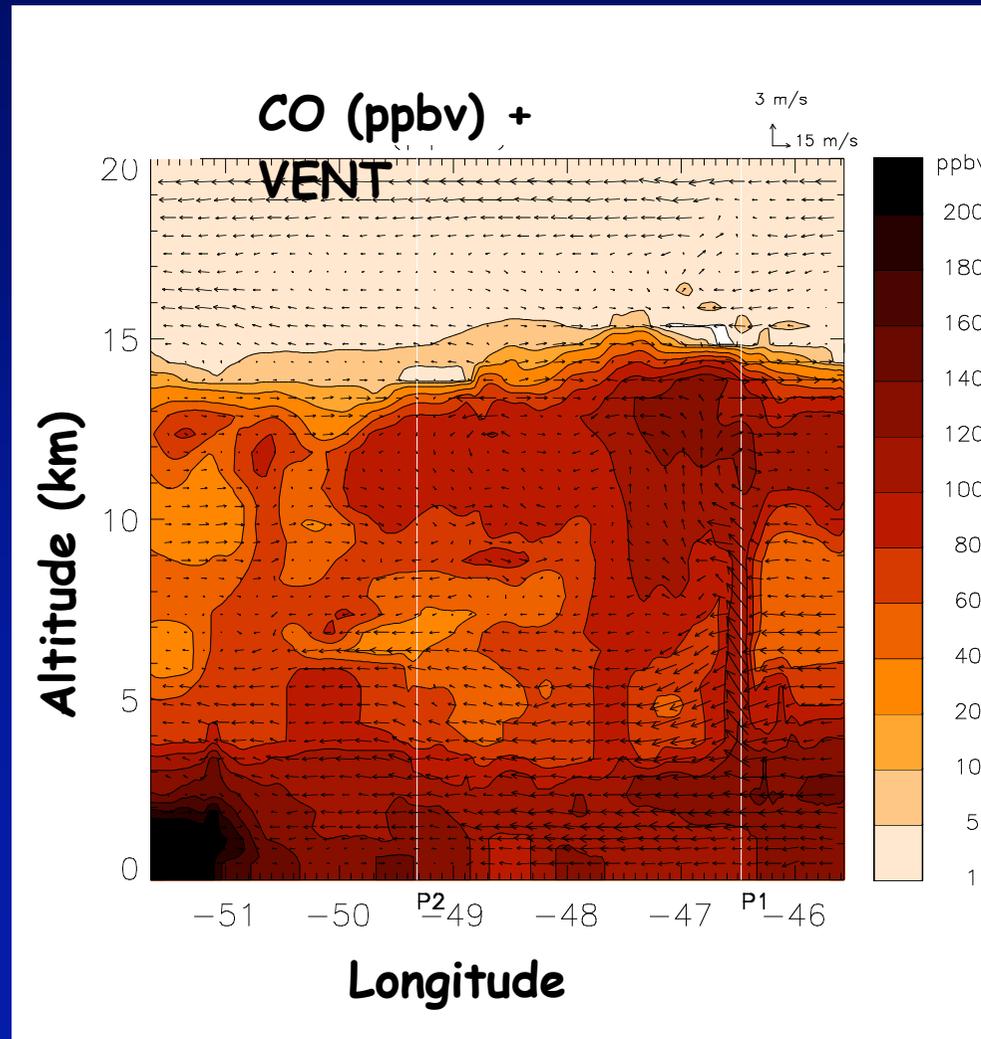
SIMULATION D'UN CAS DE CONVECTION AU BRESIL

Taux de pluie accumulé en surface
du 2001/02/08 15UT au 2001/02/09 00UT (radar de Bauru)

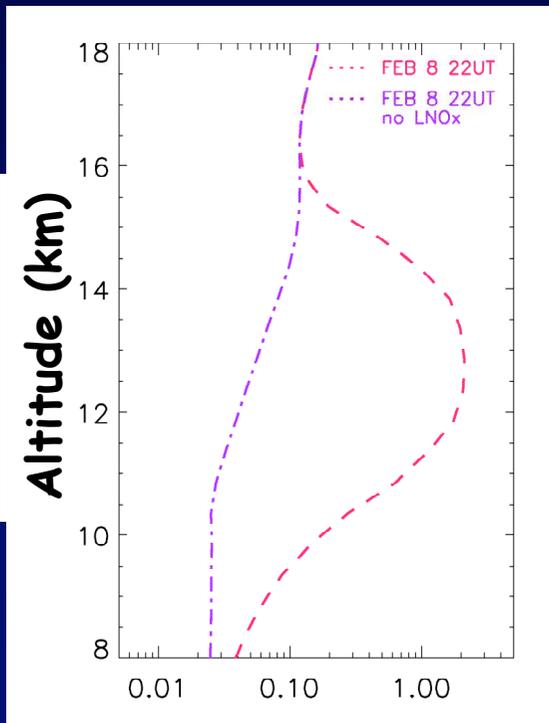


QUELQUES RESULTATS

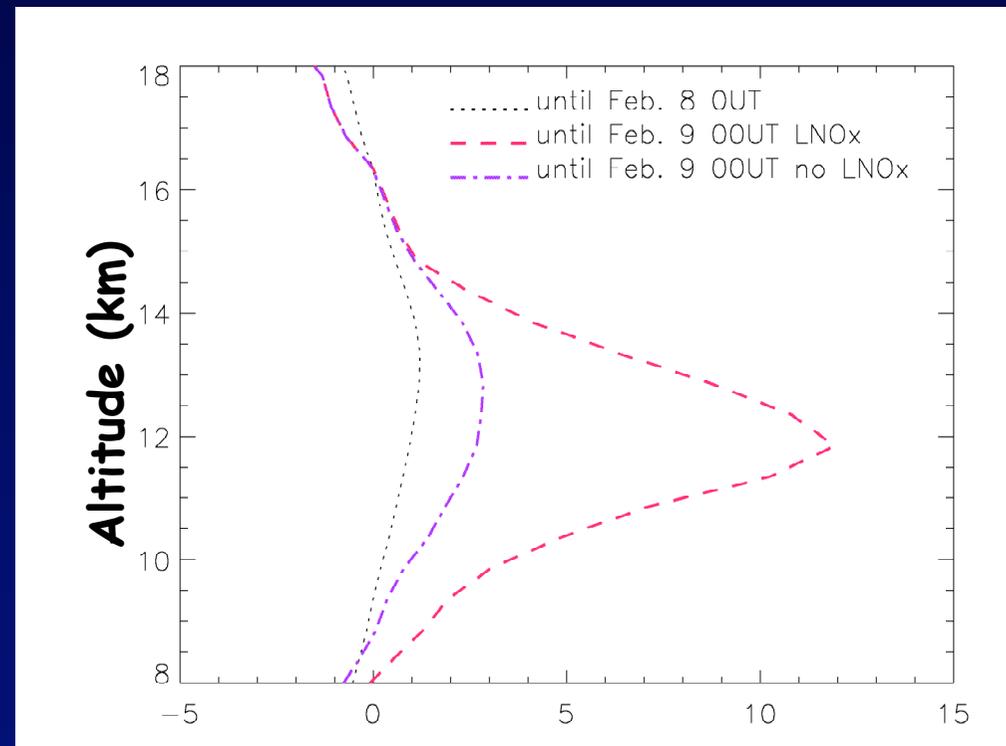
Transport des précurseurs de O_3 : exemple du traceur CO



QUELQUES RESULTATS



Quantité de NO_x moyenne dans le domaine (ppbv)



Production moyenne dans le domaine et accumulée dans le temps de O₃ (ppbv)

UTILISATIONS DU NOUVEAU MODELE Chemistry-CATT-BRAMS

- Simulations à très fine échelle pour l'étude détaillée des processus liés à la convection (projets SCOUT-O3, SHIVA)
- Modélisation de l'impact des émissions volcaniques (en collaboration avec l'ISTO)
- Modélisation de la qualité de l'air

CONCLUSIONS

- Différents outils de modélisation de chimie atmosphérique
- Transport et chimie
- Compromis entre niveau de détail de la chimie et capacité de calcul
- Le Chemistry-CATT-BRAMS: un outil pour de multiples applications