



HAL
open science

Algorithmes de Schwarz et couplage océan-atmosphère

Florian Lemarié

► **To cite this version:**

Florian Lemarié. Algorithmes de Schwarz et couplage océan-atmosphère. Mathématiques [math]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2008. Français. NNT: . tel-00343501

HAL Id: tel-00343501

<https://theses.hal.science/tel-00343501>

Submitted on 1 Dec 2008

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.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER

Discipline : Mathématiques Appliquées

Présentée et soutenue publiquement

par

LEMARIÉ Florian

Le 17 novembre 2008

Algorithmes de Schwarz et couplage océan-atmosphère

Composition du jury :

Mr	B.	BARNIER	CNRS - LEGI	Président
Mr	M. J.	GANDER	Université de Genève	Rapporteur
Mr	W.G.	LARGE	NCAR - Boulder	Rapporteur
Mme	C.	JAPHET	Université Paris 13 - LAGA	Examineur
Mr	G.	MADEC	CNRS - LOCEAN	Examineur
Mr	E.	BLAYO	Université Joseph Fourier - LJK	Co-directeur
Mr	L.	DEBREU	INRIA - LJK	Co-directeur

Thèse préparée au sein du Laboratoire Jean Kuntzmann - Grenoble

Remerciements

Je tiens à remercier en premier lieu *Martin Gander* et *Bill Large* pour m'avoir fait l'honneur de rapporter sur ces travaux. Ils ont enrichi ce manuscrit grâce à leurs remarques toujours judicieuses, c'était une chance inestimable d'avoir des scientifiques de ce niveau comme rapporteurs. Je souhaite également associer à ces remerciements *Caroline Japhet*, *Gurvan Madec* et *Bernard Barnier* pour leur passion, leur pertinence scientifique et leur intérêt pour ces travaux. Bien sûr cette thèse ne serait rien sans l'encadrement sans fautes, plein de maîtrise et de sagesse du duo *Laurent Debreu* et *Eric Blayo* mêlant compétences scientifiques, disponibilité et sympathie. Un grand merci à *Jim McWilliams* pour m'avoir accueilli 2 mois (et ce n'était qu'un début) et pour avoir montré de l'attention pour ces travaux, ainsi qu'à *Thierry Penduff* (et son ragondin) pour de nombreuses conversations, j'y associe également *Patrick Marchesiello* et *Franck Dumas*. Les différentes personnes citées précédemment ont largement contribué à l'intérêt que je porte pour les mathématiques appliquées et pour l'océanographie.

Naturellement ces 3 années ont été propices à de nombreuses rencontres, et je tiens à remercier un certain nombre de personnes : Steven et François qui ont rendu mon séjour à Los Angeles si agréable ; Claire&Claire et Innocent qui ont partagé leur espace vital avec moi ; Laurent et sa grosse dinde pour leur gentillesse et leurs talents culinaires (dans des styles différents) notamment ; Laurie, Jeff, Nico, Joy et Alex ceux avec qui tout a commencé en GM à l'INSA ainsi qu'au reste de la bien nommée communauté des creuwards pour un certain nombre de we mémorables (très peu reposants) ; Céline, Claire, Emilie, Monika, Carine, Marc, William, Morgan, Ibrahim, Ehouarn, Arthur, Olivier, Elie, Antoine, Thomas qui sont des jeunes chercheurs en devenir (ainsi que certains que j'oublie pour l'instant) ; Akim, Laurent, Nico pour des sessions CRAMAGE (CH10-Raclette-Affligem-Molière-Auberges-Géve-Etc...) et je leur associe Franck, Virginie, Cécile et Katia ; je remercie aussi celui qui n'a pas de nom pour avoir hébergé des soirées pendant lesquelles des décisions stratégiques pour ces travaux ont été prises. Je n'oublie pas également les secrétaires du labo dont Imma et Claudine pour leur aide précieuse. Evidemment, je remercie mes parents pour m'avoir soutenu durant tant d'années d'études, ainsi que Damien, Armelle et ... Lucie.

Table des matières

Introduction	1
I Problématique du couplage océan-atmosphère	11
1 Modéliser l'océan et l'atmosphère	15
1.1 Equations primitives et équations d'Euler	16
1.2 Turbulence et décomposition de Reynolds	28
1.3 Les modèles numériques	35
2 Couches limites et flux air-mer	45
2.1 Structure verticale et notion de stabilité statique	46
2.2 Description de la couche limite de surface	49
2.3 Calcul des flux air-mer	60
2.4 Paramétrisation des couches limites turbulentes	68
II Algorithmes de Schwarz optimisés pour des problèmes d'évolution	75
3 Algorithme de Schwarz optimisé pour un problème de diffusion à coefficients discontinus et constants	79
3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz	80
3.2 Introduction	90
3.3 Model problem and Optimized Schwarz Methods	91
3.4 Optimized Schwarz method with <i>Neumann-Robin</i> interface conditions	95

TABLE DES MATIÈRES

3.5	OSM for a diffusion problem with discontinuous (but constant) coefficients : two-sided Robin transmission conditions	98
3.6	Conclusion	108
3.7	Etude de convergence avec des sous-domaines de dimension finie	110
3.8	Optimisation par méthode de contrôle optimal	113
4	Algorithme de Schwarz optimisé pour un problème de diffusion à coefficients discontinus et variables	119
4.1	Introduction	122
4.2	OSM for diffusion problems with spatially variable coefficients	124
4.3	Numerical results	130
4.4	Conclusion	135
III	Algorithme de Schwarz dans le contexte du couplage océan-atmosphère	141
5	Méthodes usuelles de couplage océan-atmosphère	145
5.1	Cadre général	146
5.2	Flux moyens vs flux instantanés	151
5.3	Méthodes <i>ad-hoc</i>	151
5.4	Algorithme de Schwarz pour le couplage océan-atmosphère	159
6	Vers un algorithme mathématiquement et physiquement consistant	163
6.1	Formulation du problème	164
6.2	Etude de convergence	167
6.3	Une application avec des modèles réalistes	169
	Conclusion et perspectives	191
	Références	197

Introduction

Ce travail porte sur l'analyse d'une méthode mathématique adaptée pour le couplage de modèles numériques de l'océan et de l'atmosphère. Plus généralement il aborde la problématique du couplage océan-atmosphère dans son ensemble.

Contexte

La compréhension et la prévision de l'évolution à court et moyen terme du système climatique constituent actuellement un enjeu majeur pour la société. Cette compréhension est nécessaire aussi bien à l'échelle de la planète, pour étudier les effets à long terme de l'évolution du climat, qu'à l'échelle régionale pour prédire localement des événements extrêmes notamment. Le système climatique est formé d'un ensemble complexe de sous-systèmes dont l'océan et l'atmosphère sont les composantes principales, guidant l'évolution du climat en réponse au rayonnement solaire (seule force externe au système). L'étude de l'atmosphère, de l'océan, mais aussi de leurs interactions, sont donc les trois axes fondamentaux dans le but de comprendre et représenter le climat.

L'océanographie et la météorologie se sont structurées autour de centres opérationnels (comme par exemple l'ECMWF¹ et Météo France en météorologie ou Mercator-Océan en océanographie), afin de pouvoir répondre aux divers besoins de la société, ainsi qu'autour de grands projets (comme MERSEA² ou AMMA³) pour les activités de recherche, en amont. Les outils principaux pour accéder à la connaissance de la circulation de l'océan et de l'atmosphère sont les modèles physiques et numériques, ainsi que les observations. Les modèles numériques,

¹European Centre for Medium-Range Weather Forecasts

²Marine EnviRONment and Security for the European Area

³African Monsoon Multidisciplinary Analyses

Introduction

complexes, sont le fruit d'une longue chaîne de développement basée sur une étude physique, mathématique (caractère bien posé du problème), numérique (développement de schémas de résolution adéquats) et une étape de programmation informatique afin d'utiliser au mieux la puissance des super-calculateurs. On distingue deux principales familles de modèles : les modèles de *circulation générale*, conçus pour étudier la circulation à l'échelle globale avec des résolutions relativement grossières, et les modèles *meso-échelles* (régionaux) pour des études locales haute résolution.

Ces différents modèles numériques, de l'océan et de l'atmosphère, ont été notamment enrichis par le développement de techniques d'assimilation de données, de couplage de modèles et de raffinement de maillage (augmentation locale de la résolution) afin d'améliorer la solution physique (indépendamment des développements numériques et physiques à l'intérieur même des modèles).

- L'assimilation de données permet potentiellement d'améliorer la solution du modèle en identifiant des paramètres incertains (conditions initiales, coefficients internes, ...) grâce à l'utilisation d'observations. De plus, les outils mis en place dans ce contexte sont très utiles pour étudier la sensibilité de la solution aux paramètres du modèle.
- Le développement d'un modèle unique représentant toutes les composantes du climat n'étant pas envisageable, on préférera coupler entre eux les modèles spécifiques à chaque composante. En effet, les modèles numériques d'océan et d'atmosphère sont des entités distinctes, conçues et développées séparément. Chaque modèle "ressent" la présence de son voisin par l'intermédiaire des conditions limites de surface à l'interface air-mer. Ces conditions limites correspondent à des flux. Le couplage visera donc à assurer un échange, aussi pertinent que possible (au niveau numérique, physique et informatique), de ces flux entre les modèles.
- Une des difficultés liées au développement des modèles vient notamment du caractère fondamentalement multi-échelle en espace et en temps des phénomènes à représenter, comme l'illustre la figure 1. Ceci rend impossible, avec les moyens informatiques actuels, la représentation explicite de l'intégralité des échelles. Il faut donc fournir des modèles conceptuels simples afin que les effets physiques pertinents, mais informatiquement non résolus, soient pris en compte. Ces modèles sont communément appelés *paramétrisations* et sont utilisés lorsque des phénomènes non négligeables se produisent

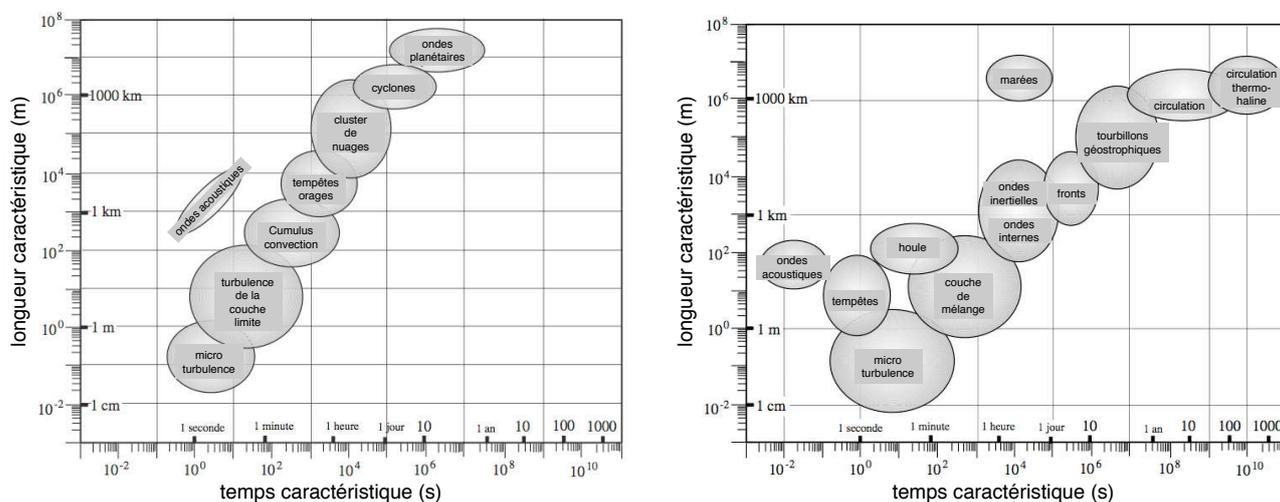


Fig. 1: Temps et longueurs caractéristiques des mouvements observés dans l’océan (à droite) et l’atmosphère (à gauche) (Source : von Storch *et al.*, 1999).

à des échelles spatio-temporelles inférieures à celles de la grille de calcul du modèle. Parmi ces phénomènes influents nous pouvons citer les phénomènes turbulents dans les couches limites de l’océan et de l’atmosphère près de l’interface air-mer et la turbulence de petite et meso-échelle dans les fluides. Le comportement d’un modèle est fortement lié aux schémas de paramétrisations mais ceux-ci demeurent imparfaits car basés sur le concept de turbulence difficile à appréhender car fondamentalement aléatoire. Dans ce contexte, les méthodes de raffinement de maillage sont intéressantes. En effet, non seulement ces méthodes permettent de réduire les erreurs de troncature des schémas numériques mais elles permettent, a priori, une meilleure représentation de la turbulence dans les régions raffinées. On cherchera donc à raffiner les zones où les phénomènes turbulents sont jugés particulièrement importants, à savoir principalement les zones côtières dans l’océan et les zones à fort gradient de topographie dans l’atmosphère.

Parmi les trois types de méthodologies citées précédemment l’assimilation de données est probablement la plus répandue et utilisée depuis le début des années 90, notamment dans les centres opérationnels. Une revue peut être trouvée dans Navon (2008). Le développement

Introduction

de logiciels de différentiation automatique, comme TAMC¹, en facilite la mise en oeuvre. Les méthodes de raffinement de maillage ont fait l'objet, depuis une dizaine d'années, de développements théoriques et informatiques (Debreu & Blayo, 2008), et un certain nombre de modèles propose ce type de potentialité, notamment via la librairie AGRIF². Enfin, le couplage de modèles, dans le contexte du raccordement entre les modèles d'océan et d'atmosphère, reste probablement la voie vers laquelle le plus de travail reste à fournir, essentiellement d'un point de vue physique mais également numérique. Pour les aspects informatiques, des logiciels comme OASIS³ ou MCT⁴ ont été développés. Le problème de couplage est un point crucial pour une bonne modélisation de l'évolution du climat car les interactions entre ces deux milieux sont fortes. Il est donc indispensable de mettre en oeuvre une méthode efficace pour aboutir à un couplage consistant entre les modèles numériques de l'océan et de l'atmosphère. Ce couplage est indispensable pour une bonne représentation d'un certain nombre de phénomènes comme les *upwelling* côtiers dans l'océan, la formation et la propagation des cyclones dans l'atmosphère, etc. Les méthodes actuelles de couplage n'assurent pas une égalité stricte des flux à l'interface air-mer et fournissent donc une solution approchée du "vrai" problème. Ces méthodes *ad-hoc* partent de l'hypothèse que cette solution approchée est physiquement acceptable et que la consistance de la solution à l'interface n'est pas indispensable. Cependant aucune étude précise de ce postulat n'a été menée.

Pour des simulations climatiques, des algorithmes *ad-hoc*, fournissant des résultats satisfaisants, ont été proposés par exemple dans le cadre de modèles communautaires comme CCSM⁵, et plus généralement dans le contexte des simulations climatiques réalisées par le GIEC⁶. Pour ce type de simulation on s'intéresse à des phénomènes faiblement non-linéaires à échelles de temps très longues. Cependant, dès que l'on s'intéresse à des simulations régionales pour lesquelles les non-linéarités sont marquées et où les interactions entre les milieux se font sur des échelles plus rapides, peu de réponses ont été apportées. Au niveau algorithmique seules des méthodes de couplage au niveau du pas de temps des modèles ont été proposées. Jusqu'à présent un nombre relativement important d'applications réalistes ont été effectuées, mais l'étude de ce couplage d'un point de vue numérique et, à un degré moindre, physique

¹Tangent linear and Adjoint Model Compiler : <http://www.autodiff.com/tamc/>

²Adaptive Grid Refinement In Fortran : <http://www-ljk.imag.fr/MOISE/AGRIF/index.html>

³Ocean Atmosphere Sea Ice Soil : <http://www.cerfacs.fr/globc/software/oasis/>

⁴Model Coupling Toolkit : <http://www-unix.mcs.anl.gov/mct/>

⁵Community Climate System Model

⁶Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat

a été très peu abordée. Plus généralement, de notre point de vue ce qui fait défaut pour le moment est l'absence d'un cadre théorique pour étudier cette problématique.

Un cadre théorique adéquat : le couplage par méthodes de Schwarz

Compte tenu des différents éléments indiqués dans la première partie de cette introduction, nous proposons dans ce manuscrit de nous intéresser à l'application des méthodes de décomposition de domaine de type Schwarz global en temps au couplage océan-atmosphère. De notre point de vue ce type de méthode est pertinent pour effectuer un couplage "propre" d'un point de vue mathématique et numérique.

Le principe de base des méthodes de décomposition de domaine consiste à réduire les problèmes de grande taille et sur géométrie complexe en un ensemble de sous-problèmes de taille réduite sur des géométries simples. Les applications sont diverses, allant du calcul parallèle au calcul multi-physiques en passant par la résolution de systèmes linéaires en grande dimension ou mal conditionnés. Une littérature abondante est consacrée à ce type de méthode essentiellement depuis la démocratisation des calculateurs parallèles. Il se tient d'ailleurs tous les 18 mois, depuis 1987, une conférence¹ internationale consacrée aux méthodes de décomposition de domaine et qui fait l'objet de *proceedings* constituant une source d'informations très riche. Ces méthodes englobent toute une famille de méthodes itératives dont une revue exhaustive est faite dans Quarteroni & Valli (1999) ou Toselli & Widlund (2004). La première méthode apparue dans la littérature est issue des travaux de Schwarz (1869) pour montrer l'existence et l'unicité des solutions de l'équation de Poisson sur un domaine de forme irrégulière. L'algorithme de Schwarz reposait sur une décomposition spatiale du domaine de calcul en sous-domaines de formes simples se recouvrant et échangeant successivement des conditions limites jusqu'à convergence du processus. On parle de *conditions de transmission* pour caractériser les échanges entre les sous-domaines. Ces conditions doivent permettre d'imposer une certaine consistance (continuité des valeurs, de la dérivée normale ou égalité des flux ...) de la solution sur les interfaces entre sous-domaines. Dans cet algorithme les sous-domaines se recouvrent mais grâce à des travaux plus récents (de P.L. Lions notamment) cette méthode a été généralisée à des sous-domaines ne se recouvrant

¹voir <http://www.ddm.org>

Introduction

pas. Dans le souci de proposer une méthode compétitive de nouvelles formes de conditions de transmission ont été construites pour les algorithmes de type Schwarz afin d'optimiser le taux de convergence. Elles correspondent à une généralisation des conditions proposées par Lions en introduisant un certain nombre de paramètres libres qui constituent autant de paramètres d'optimisation. La phase d'optimisation conduit à l'obtention de *conditions de transmission optimisées*. Plus récemment une version *globale en temps* de l'algorithme a été proposée pour étendre la méthode, originellement appliquée à des problèmes stationnaires, à des problèmes instationnaires. Le principe est de découper la durée totale de simulation en fenêtres de temps plus petites, puis à résoudre en espace et en temps les équations sur chaque sous-domaine sur la durée de la fenêtre temporelle, et à transmettre les informations pertinentes aux voisins à la fin de la fenêtre de temps. Les informations échangées sont des fonctions des variables d'interface et du temps.

Dans le cadre de la modélisation de l'océan, une application de l'algorithme de Schwarz (avec recouvrement et échange de données de type Dirichlet-Dirichlet) a déjà été réalisée. Il s'agissait du couplage entre un modèle de circulation générale basse résolution et un modèle régional haute résolution (Cailleau *et al.*, 2008). Nous souhaitons, dans cette thèse, envisager ce type d'algorithme dans le cadre d'une problématique différente, pour le couplage de modèles simulant le comportement de fluides aux propriétés physiques hétérogènes comme l'océan et l'atmosphère.

Application au couplage océan-atmosphère

Les méthodes de Schwarz apparaissent tout à fait appropriées dans le contexte du couplage océan-atmosphère. Tout d'abord, d'un point de vue informatique, cet algorithme est aisément parallélisable car les sous-domaines échangent des informations uniquement à la fin de chaque fenêtre de temps, ce qui est plus efficace qu'un échange au niveau du pas de temps des modèles. De plus la méthode peut être mise en oeuvre en utilisant les outils informatiques de couplage existants mentionnés auparavant. Une propriété intéressante est que les traitements numériques en temps et en espace peuvent être différents sur chaque sous-domaine, il n'est donc pas nécessaire de modifier les parties numériques des modèles. Enfin, l'algorithme assure un couplage au sens fort entre les sous-domaines. Les méthodes de Schwarz globales en temps reposent sur une base théorique forte notamment grâce aux

travaux de L. Halpern, M. Gander et F. Nataf. Elles proposent donc un cadre théorique dans lequel le couplage océan-atmosphère peut être posé, ce qui a rarement été fait. A notre connaissance, seule une analyse mathématique de ce problème a été réalisée, dans un cadre simplifié (Temam *et al.*, 1995). Au niveau des points faibles de la méthode, dans le cadre de notre étude, nous pouvons citer le recours à un processus itératif qui implique un coût de calcul important (le coût des modèles est multiplié par le nombre d'itérations) et le peu de travaux menés au niveau théorique pour traiter des problèmes multi-physiques traitant des fluides turbulents.

Le problème de couplage que l'on souhaite traiter n'est pas trivial notamment à cause du manque de connaissances précises de la physique à l'interface air-mer et de la complexité des modèles numériques à considérer. On devra donc s'assurer de la bonne prise en compte des contraintes physiques à l'interface et tenter de minimiser les modifications à apporter aux modèles numériques existants. Dans le formalisme de la méthode de Schwarz ce type de couplage revient à considérer deux sous-domaines sans recouvrement avec des propriétés physiques différentes. La mise en place du problème passe par les étapes suivantes :

- la spécification des équations à traiter sur chaque sous-domaine
- la consistance que l'on souhaite imposer à l'interface entre ces deux sous-domaines
- la mise en place et l'étude de convergence de l'algorithme correspondant

Par le terme de "consistance", nous pouvons aussi inclure la consistance nécessaire entre l'approche numérique et les paramétrisations physiques usuelles des couches limites. Le formalisme précédent peut également être complété par une phase d'optimisation de la vitesse de convergence de l'algorithme.

Organisation du mémoire

Ce mémoire est structuré autour de trois parties constituées chacune de deux chapitres. Nous commençons par une description détaillée de la problématique du couplage océan-atmosphère. Dans le premier chapitre, nous définissons les équations descriptives de ces deux milieux qui sont à la base des modèles numériques. Cette définition est complétée par des notions de turbulence et une description des techniques numériques usuelles de résolution. Lorsque l'on désire coupler deux modèles, le comportement physique à l'interface de ceux-ci doit faire l'objet d'une attention toute particulière. Dans cette optique, le second chapitre propose une description détaillée des couches limites autour de l'interface air-mer. Nous

Introduction

introduisons les schémas de paramétrisations usuels utilisés pour décrire le comportement turbulent des fluides dans ces régions. Nous posons de plus le problème de couplage dans le formalisme de l'algorithme de Schwarz sous la forme d'un couplage de deux équations de diffusion à coefficients variables et discontinus à l'interface. La seconde partie se compose de deux articles axés sur l'étude théorique de l'algorithme de Schwarz global en temps. Le premier article traite de la détermination de conditions de transmission optimisées pour un problème modèle simplifié avec des coefficients de diffusion constants. Le second propose une approche nouvelle pour traiter le problème complet avec des coefficients variables suggérés par les schémas de paramétrisation. Ces études menées sur un problème continu sont complétées par une méthodologie d'optimisation de convergence au niveau du problème discrétisé en se basant sur les méthodes de contrôle optimal. Enfin, dans la troisième partie nous faisons la synthèse des deux premières parties pour aborder spécifiquement le problème de couplage océan-atmosphère. Dans le chapitre 5 nous étudions de plus près les algorithmes usuels de couplage et nous montrons les points forts de notre approche. Dans le chapitre 6 le problème de couplage avec toute sa complexité au niveau physique est formulé. Nous montrons la convergence de l'algorithme correspondant, sous certaines hypothèses simplificatrices. Pour valider notre étude théorique le couplage de deux modèles régionaux réalistes *meso-échelles* est effectué afin de simuler la formation et la propagation d'un cyclone tropical. Nous concluons ce document en présentant les perspectives qui nous semblent pertinentes pour ces travaux.

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein de l'équipe MOISE ("Modélisation, Observations, Identification pour les Sciences de l'Environnement") du Laboratoire Jean Kuntzmann, laboratoire sous tutelle commune CNRS-INPG-UJF-INRIA. Ce travail a été soutenu par l'ACI Jeunes Chercheurs "Etudes mathématiques de paramétrisations en océanographie", l'ANR COMMA ("COuplage Multi-échelles et multi-physique : Modèles et Algorithmes") et l'ANR "Cyclones et Climat". Les études menées ont donné lieu aux publications et présentations orales suivantes :

- F. Lemarié, L. Debreu, and E. Blayo. *Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 1 : the constant coefficients case*, soumis à SIAM Journal of scientific Computing.
- F. Lemarié, L. Debreu, and E. Blayo. *Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 2 : the variable coefficients case*, soumis à SIAM Journal of scientific Computing.
- F. Lemarié, P. Marchesiello and L. Debreu. *Global-in-time Schwarz method applied to Two-Way Ocean-Atmosphere coupling : a study of tropical cyclone Erica*, soumis à Geophysical Research Letter.
- P. Marchesiello, J. Lefèvre, P. Penven, F. Lemarié, L. Debreu, A. Vega, P. Douillet, V. Echevin, and B. Dewitte. *Keys to affordable regional marine forecast systems*, Mercator newsletter July 2008.
- F. Lemarié, L. Debreu and E. Blayo, *Vers un algorithme mathématiquement et physiquement consistant pour le couplage Océan-Atmosphère*, Laboratoire de Physique des Océans, Brest (Octobre 2008)
- F. Lemarié, L. Debreu and E. Blayo, *Global-in-time Schwarz method applied to Two-Way Ocean-Atmosphere coupling*, 2008 ROMS/TOMS European Workshop, Grenoble (Octobre 2008)
- F. Lemarié, L. Debreu and E. Blayo, *Optimized Schwarz methods in the context of ocean-atmosphere coupling*, European Seminar on Coupled Problems, Jetrichovice, Czech Republic (Juin 2008)
- F. Lemarié, L. Debreu and E. Blayo, *Ocean-Atmosphere coupling, towards a mathematically and physicaly consistent algorithm*, University of California at Los Angeles (Avril 2008)
- F. Lemarié, L. Debreu and E. Blayo, *Méthodes mathématiques et numériques pour le couplage océan-atmosphère à échelle régionale*, 3ème Congrès national de mathématiques appliquées et industrielles, SMAI 2007. Praz sur Arly, France (Juin 2007)

Introduction

Première partie

**Problématique du couplage
océan-atmosphère**

Cette première partie est dédiée à la présentation de la problématique du couplage océan-atmosphère. L'objectif est d'introduire les concepts de base au niveau mathématique et physique liés à ce type de couplage. Il est en effet important de traiter les aspects mathématiques en prenant en considération les principes physiques car il y a une corrélation forte entre les détails physiques que l'on souhaite représenter et les techniques de résolution numérique associées.

L'étude de la circulation océanique et atmosphérique passe notamment par le développement de modèles numériques. Ces modèles ont pour but de décrire l'évolution de ces deux fluides dans l'espace et le temps. Cette description est basée avant tout sur des concepts et théories physiques qui ont ensuite été formulées de manière mathématique. Nous présenterons dans un premier temps les équations constitutives des divers modèles ainsi que les méthodes numériques usuelles de résolution. Nous aborderons ensuite les principes de turbulence et d'échelles *sous-maille*. Il n'est pas envisageable qu'un modèle numérique puisse représenter explicitement la totalité des échelles spatiales et temporelles jusqu'à la micro-échelle (considérée en général arbitrairement de l'ordre de 1mm en espace et 1s en temps). Des paramétrisations sont alors mises au point pour prendre en compte l'effet des processus non résolus. Ces processus sont appelés *sous-maille* car ils se produisent à des échelles inférieures à celle du maillage. Cependant, comme nous le verrons, les paramétrisations de turbulence sous-maille ne font de manière générale pas consensus et doivent donc être considérées avec beaucoup de précautions. Ces paramétrisations sont liées au concept de turbulence qui n'a pas de base théorique unanimement acceptée.

Dans un second chapitre nous introduisons les méthodes habituelles d'estimation des flux air-mer. A leur interface commune, l'océan et l'atmosphère échangent, de manière continue, des flux. L'interface océan atmosphère est en effet le lieu de nombreux phénomènes physiques couvrant un large spectre de fréquences temporelles et spatiales. Cette complexité rend la représentation des échanges air-mer extrêmement compliquée et relativement incertaine. Il faut bien utiliser le terme "d'estimation" de flux car notre connaissance actuelle de ces flux est encore relativement limitée.

Ce manuscrit ne s'adressant pas uniquement à des personnes initiées à la modélisation des fluides géophysiques, nous avons jugé nécessaire d'en présenter en détails certains aspects. C'est ce que nous faisons dans cette première partie.



1

Modéliser l'océan et l'atmosphère

Sommaire

1.1	Equations primitives et équations d'Euler	16
1.1.1	Lois de conservation	16
1.1.2	Les hypothèses de la modélisation océanique	18
1.1.3	Les hypothèses de la modélisation atmosphérique	22
1.1.4	Systèmes d'équations usuels	23
1.1.5	Conditions limites et conditions initiales	24
1.2	Turbulence et décomposition de Reynolds	28
1.2.1	Séparation d'échelles	28
1.2.2	Décomposition de Reynolds	29
1.2.3	Paramétrisation sous-maille	32
1.2.4	Remarques	33
1.3	Les modèles numériques	35
1.3.1	Discrétisation des équations	35
1.3.2	Schémas numériques et décomposition en modes	37
1.3.3	Choix de la coordonnée verticale	40
1.3.4	Exemples	42

L'eau et l'air sont des fluides newtoniens dont l'écoulement est décrit, dans l'approximation des milieux continus, par les équations de Navier-Stokes. Cependant l'utilisation de ces équations sans hypothèses supplémentaires reviendrait à considérer une grande variété de

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

phénomènes à des échelles temporelles et spatiales très variées. En effet, toutes les classes d'échelles et de mouvements sont décrites par ces équations.

Le calcul de la circulation générale jusqu'à l'échelle de la dissipation (de l'ordre de quelques millimètres) impliquerait un coût de calcul déraisonnable. Des simplifications sont donc apportées aux équations de Navier-Stokes afin de filtrer certains phénomènes à échelles de temps et d'espace trop petites. Dans ce chapitre, nous décrirons ces simplifications, ainsi que leur justification. Ceci nous conduira aux systèmes d'équations visant à décrire la circulation des océans et de l'atmosphère. Les conditions initiales et limites nécessaires à ces systèmes seront ensuite présentées. Afin de passer de la forme continue des équations à leur forme discrète, nous introduirons la notion d'*échelles sous-maille*. Enfin nous discuterons de certains aspects liés aux modèles numériques.

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

Nous allons établir dans cette section les systèmes d'équations aux dérivées partielles instationnaires décrivant la circulation des océans et de l'atmosphère. Ces équations sont basées sur des principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et des traceurs. Une description approfondie de ces équations peut être trouvée, par exemple, dans McWilliams (2007). Nous appellerons *traceurs* les quantités scalaires qui sont transportées et mélangées par la dynamique, comme par exemple la température. Dans la suite nous noterons ρ la densité, p la pression, ϑ une quantité scalaire et $\vec{U} = (u, v, w)$ les composantes de la vitesse. De manière classique nous noterons z la coordonnée dans la direction verticale, x dans le sens ouest-est (composante *zonale*) et y dans le sens sud-nord (composante *méridionale*).

1.1.1 Lois de conservation

Les considérations présentées dans cette partie s'appliquent aussi bien à l'océan qu'à l'atmosphère.

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

Conservation de la masse

La masse d'un ensemble de particules est conservée lors du mouvement. La conservation de la masse se traduit par l'équation de continuité qui s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U}) = \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (1.1)$$

où $\frac{D}{Dt}$ est la dérivée matérielle définie par $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla$. L'opérateur $\vec{U} \cdot \nabla$ correspond à l'advection, qui représente le transport d'une quantité par un champ vectoriel.

Conservation de la quantité de mouvement

Dans un repère absolu (non tournant), si l'on applique le principe fondamental de la dynamique (seconde loi de Newton) à un ensemble de particules en mouvement, l'accélération absolue résultera des forces dues au potentiel de gravitation Φ_a (dans le repère absolu), ainsi qu'aux contraintes internes de pression et de viscosité $\mathcal{F}(\vec{U})$. La conservation de la quantité de mouvement s'écrit ainsi

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = \rho \nabla \Phi_a - \nabla p + \rho \mathcal{F}(\vec{U}) \quad (1.2)$$

En pratique, l'équation (1.2) s'exprime dans un repère lié à la terre, tournant donc à la vitesse angulaire Ω . En notant Φ le potentiel de forces dans le milieu tournant, dans ce nouveau repère (1.2) devient

$$\frac{\partial \rho \vec{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{U} \otimes \vec{U}) = -2\Omega \wedge \rho \vec{U} + \rho \nabla \Phi - \nabla p + \rho \mathcal{F}(\vec{U}) \quad (1.3)$$

qui, en utilisant (1.1), peut s'écrire

$$\frac{D\vec{U}}{Dt} = -2\Omega \wedge \vec{U} + \nabla \Phi - \frac{\nabla p}{\rho} + \mathcal{F}(\vec{U}) \quad (1.4)$$

La rotation du repère fait apparaître la force de Coriolis, $-2\Omega \wedge \vec{U}$, dans le membre de droite. Le système composé des équations (1.2) (ou (1.4)) et (1.1) correspond au système de Navier-Stokes.

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

Conservation des traceurs

L'évolution d'un traceur ϑ est décrite par l'équation de conservation

$$\frac{\partial \rho \vartheta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vartheta \vec{U}) = \rho \mathcal{F}(\vartheta) \quad (1.5)$$

où $\mathcal{F}(\vartheta)$ est un terme "sources-puits". Dans l'océan les traceurs actifs sont la salinité S et la température T qui agissent sur la densité ρ par l'intermédiaire d'une équation d'état $\rho = \rho(T, S, p)$. Dans le cas de la salinité $\mathcal{F}(S)$ correspond à de la diffusion avec une diffusivité K_S , i.e. $\mathcal{F}(S) = K_S \Delta S$. Pour la température, la conservation de la chaleur fait intervenir la première loi de la thermodynamique et $\mathcal{F}(T)$ contient des termes supplémentaires. Dans l'atmosphère les deux principaux traceurs actifs sont la température et l'humidité. Par soucis de simplicité la capacité calorifique de l'air a été omise précédemment, mais celle-ci pouvant varier de manière significative avec le temps il est parfois préférable d'intégrer cette quantité dans (1.5) ce qui revient à considérer $\vartheta = c_p T$.

Comme nous l'avons mentionné précédemment les équations présentées jusqu'ici font l'objet de simplifications lorsque l'on souhaite représenter la circulation océanique ou atmosphérique.

1.1.2 Les hypothèses de la modélisation océanique

Dans cette section nous présentons les approximations usuelles faites sur le système d'équations (1.1), (1.3) et (1.5). Dans un premier temps nous nous intéressons à la modélisation de l'océan.

Hypothèse anélastique

Dans l'océan, les processus élastiques correspondent à une réponse rapide du volume occupé par une certaine masse d'eau en fonction des perturbations qui lui sont appliquées. L'évolution d'une masse d'eau donnée est décrite par l'équation de continuité (1.1). En cas de fluctuations de pression le système génère une propagation d'ondes de pression rapides, de type acoustique. Les modes acoustiques, de par leur rapidité, imposent une restriction sévère sur le pas de temps lorsque l'on considère des schémas numériques de type explicite. Les équations de Navier-Stokes permettent le développement de telles ondes mais en pratique ces ondes ne contribuent pas de manière significative à la circulation générale. L'objectif sera donc de les filtrer dans l'équation de continuité, comme initialement proposé dans Ogura &

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

Phillips (1962). Si l'on considère une équation d'état de l'eau de mer, les ondes acoustiques ne peuvent être intégrées de manière consistante. En effet, si on intègre simultanément l'équation de continuité (1.1) et l'équation d'état $\rho = \rho(T, S, p)$ deux valeurs différentes pour la densité ρ seraient obtenues. Dans le but de faire apparaître la vitesse des ondes acoustiques dans les équations, on différencie l'équation d'état

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial T}\bigg|_{S,p} \frac{DT}{Dt} + \frac{\partial\rho}{\partial S}\bigg|_{T,p} \frac{DS}{Dt} + \frac{\partial\rho}{\partial p}\bigg|_{S,T} \frac{Dp}{Dt} \quad (1.6)$$

Si l'on considère (1.6) l'équation de continuité (1.1) à température et salinité constante (adiabatique) peut se réécrire

$$\frac{1}{\rho c_s} \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (1.7)$$

avec $c_s^{-2} = \frac{\partial\rho}{\partial p}\bigg|_{S,T}$ la vitesse des ondes acoustiques. Nous pouvons tout d'abord remarquer qu'en remplaçant (1.1) par (1.7) l'inconsistance mentionnée auparavant a disparu. L'objectif est maintenant de supprimer le terme $\frac{Dp}{Dt}$ de (1.7) pour supprimer l'effet des ondes acoustiques mais en conservant la compressibilité (en effet, supposer l'incompressibilité filtre naturellement les ondes acoustiques). Pour ce faire on décompose la pression en une pression de référence $p_0(z)$ et une perturbation p' . On aura donc $\rho = \rho(T, S, p_0(z) + p')$. On suppose de plus que cet état de référence est en équilibre hydrostatique

$$p = p_0(z) + p' \quad \rho = \rho_0(z) + \rho' \quad \text{avec} \quad \frac{\partial p_0}{\partial z} = -g\rho_0(z) \quad (1.8)$$

En considérant que les échelles d'espace et de temps des processus qui nous intéressent sont plus grandes que celles des ondes acoustiques, il est possible de faire l'hypothèse que $\frac{Dp'}{Dt} \ll \left(\frac{Dp_0}{Dt}, \nabla \cdot \vec{U}\right)$ dans l'équation de continuité et $p' \ll p_0$ dans l'équation d'état. En remarquant que $\frac{Dp_0}{Dt} = w \frac{\partial p_0}{\partial z}$ (car p_0 ne dépend que de z), l'équation (1.7) donne l'équation de continuité anélastique et une nouvelle équation d'état est également obtenue

$$\nabla \cdot \vec{U} = \frac{g\rho_0}{c_s^2 \rho} w \quad \rho = \rho(T, S, p_0(z)) \quad (1.9)$$

Nous obtenons donc le système suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{U} = \frac{g\rho_0}{c_s^2 \rho} w \\ \frac{D\vec{U}}{Dt} + 2\Omega \wedge \vec{U} = \nabla \Phi' - \frac{\nabla p'}{\rho} + \mathcal{F}(\vec{U}) \\ \rho = \rho(T, S, p_0) \end{array} \right. \quad (1.10)$$

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

où $\nabla\Phi' = (0, 0, g\rho'/\rho)^t$. Ce système correspond aux équations de Navier-Stokes sous l'hypothèse anélastique. p' est dans ce cas diagnostiqué en résolvant une équation elliptique

$$\nabla^2 p' = \rho \nabla \cdot \mathbf{G} \quad \text{avec } \mathbf{G} = -2\Omega \wedge \vec{U} + \nabla\Phi' - (\vec{U} \cdot \nabla)\vec{U} \quad (1.11)$$

à chaque pas de temps.

Hypothèse de Boussinesq

Le prélude sur l'approximation anélastique permet naturellement d'introduire l'approximation de Boussinesq. En partant de l'observation que les variations de densité sont petites dans l'océan ($\Delta\rho/\rho \approx 10^{-3}$) les effets de compressibilité peuvent être considérés comme négligeables. En pratique cela revient à considérer dans (1.8) que la densité de référence ρ_0 devient indépendante de z et donc que $p_0(z) = -g\rho_0 z$ (équilibre hydrostatique dans (1.8)). Cette hypothèse permet de remplacer la densité, à chaque fois qu'elle apparaît, par ρ_0 . Le système sous l'approximation de Boussinesq s'écrit alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \vec{U} = 0 \\ \frac{D\vec{U}}{Dt} + 2\Omega \wedge \vec{U} = \frac{\rho'}{\rho_0} \nabla\Phi - \frac{\nabla p'}{\rho_0} + \mathcal{F}(\vec{U}) \\ \rho = \rho(T, S, -g\rho_0 z) \end{array} \right. \quad (1.12)$$

Cette hypothèse s'avère précise.

L'approximation "traditionnelle"

Les termes dynamiques associés à la composante horizontale de la rotation de la terre sont généralement négligés. Cette approximation est nommée "approximation traditionnelle". Elle est appliquée dans la plupart des études de dynamique des fluides géophysiques. Si l'on note $\Omega = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$ le vecteur de rotation angulaire de la terre, la conservation de la quantité de mouvement sur la verticale s'écrit d'après (1.2)

$$\frac{Dw}{Dt} + 2\Omega_x v - 2\Omega_y u = -\frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial p}{\partial z} + g\rho \right] + \mathcal{F}(w) \quad (1.13)$$

L'approximation traditionnelle revient à considérer Ω_x et Ω_y négligeables et ainsi la rotation et la gravité sont colinéaires (ce qui n'est rigoureusement vrai qu'aux pôles). Des travaux

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

récents ont montré que cette hypothèse n'est pas toujours justifiée (Wirth & Barnier, 2008). Elle est en pratique justifiée si les vitesses verticales sont petites par rapport aux vitesses horizontales. L'axe de rotation a une influence directe sur la direction de la convection et ainsi l'approximation traditionnelle a tendance à dévier la convection dans certains cas. De plus Ω_x et Ω_y sont nécessaires pour la stricte conservation du moment angulaire. Nous avons utilisé l'équation (1.13) pour illustrer notre propos, les termes Ω_x et Ω_y sont également négligés dans les équations pour u et v .

Cette approximation est en pratique totalement justifiée si conjointement l'hypothèse hydrostatique est faite. Cependant à partir du moment où l'hypothèse hydrostatique est relâchée il doit en être de même pour l'approximation traditionnelle (Kanarska *et al.*, 2007). Une alternative est de relâcher l'hypothèse traditionnelle seule en gardant l'hydrostaticité : on parle alors d'approximation quasi-hydrostatique.

Hypothèse hydrostatique

L'hypothèse hydrostatique consiste à négliger les termes d'accélération sur la verticale devant le gradient vertical de pression et la flottabilité. Cette approximation est basée sur une étude d'échelles. Notons L et H les échelles horizontales et verticales caractéristiques de l'écoulement, U la vitesse horizontale caractéristique et N la fréquence de Brunt-Väisala définie par $N^2 = -\frac{g}{\rho_0} \frac{\partial \rho_0}{\partial z}$. Nous pouvons alors définir les quantités sans dimensions suivantes

$$\delta = \frac{H}{L} \quad Fr = \frac{U}{NH} \quad Ro = \frac{U}{2|\Omega|L} \quad (1.14)$$

appelées respectivement rapport d'aspect, nombre de Froude et nombre de Rossby. Ces nombres sans dimension sont en général petits dans les applications usuelles.

L'importance relative de $\frac{Dw}{Dt}$ devant $g\rho'$ peut être quantifiée par $\frac{U^2}{N^2L^2} = \delta^2 Fr^2$. De même l'importance relative de $\frac{Dw}{Dt}$ devant le gradient vertical de pression $\frac{\partial p'}{\partial z}$ peut être quantifiée par $\frac{H^2U^2}{4|\Omega|^2L^4} = \delta^2 Ro^2$. Si l'on suppose

$$\delta^2 Fr^2 \ll 1 \quad \delta^2 Ro^2 \ll 1 \quad (1.15)$$

l'équation de conservation de la quantité de mouvement sur la verticale dans (1.12) devient

$$\frac{\partial p'}{\partial z} = -\rho'g \quad (1.16)$$

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

Cette hypothèse est totalement justifiée si l'on s'intéresse à la circulation grande échelle et est donc toujours adoptée dans les modèles de circulation générale. Etant donné le fait que les rapports d'aspects et nombres de Froude et Rossby sont différents dans l'océan et l'atmosphère, la nécessité de relâcher l'hypothèse hydrostatique n'intervient pas aux mêmes échelles pour ces deux milieux. En effet des phénomènes non-hydrostatiques apparaissent à méso-échelle dans l'atmosphère et seulement lorsque l'on commence à s'intéresser à de la sub-méso-échelle dans l'océan. C'est en partie pour cette raison que les modèles régionaux non-hydrostatiques de l'atmosphère sont maintenant très nombreux comparativement à ceux de l'océan.

1.1.3 Les hypothèses de la modélisation atmosphérique

Nous abordons maintenant les simplifications généralement apportées aux équations de Navier-Stokes pour modéliser l'atmosphère.

L'approximation fluide parfait

Contrairement à l'eau de mer qui est peu compressible, l'air, qui est un gaz, peut être comprimé et par la même occasion chauffé. En pratique l'atmosphère sèche est assimilée à un gaz parfait (donc non-visqueux). Son évolution est alors décrite par les équations d'Euler et non pas par celles de Navier-Stokes (notons qu'en réalité un fluide non-visqueux n'existe pas : en effet dans un fluide en écoulement il s'établit toujours au proche voisinage d'un objet solide une couche limite). L'équation d'état de l'atmosphère est donc semblable à celle d'un gaz parfait

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (1.17)$$

et son état thermique dépendra de la pression. $R = 287.058 J.kg^{-1}.K^{-1}$ est la constante des gaz pour l'air sec. Cette équation peut être reformulée pour diagnostiquer p , (McWilliams, 2007)

$$p = p_0 \left(\frac{R\rho\theta}{p_0} \right)^\gamma \quad \text{avec } \theta = T \left(\frac{p}{p_0} \right)^{R/c_p} \quad (1.18)$$

où p_0 est une pression de référence constante, $\gamma = c_p/c_v$ avec c_p et c_v les capacités calorifiques de l'air à pression constante et à volume constant. θ est la température potentielle, qui

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

correspond par définition à la température lorsque l'on ramène de façon adiabatique une parcelle d'air soumise à la pression p à la pression de référence p_0 .

Traitement des ondes acoustiques

L'approximation anélastique décrite précédemment dans le cadre des équations de l'océan a été originellement introduite pour l'atmosphère dans une version un peu différente. En effet les équations d'état diffèrent entre l'eau de mer et l'air. Contrairement à l'océan où l'hypothèse de Boussinesq est quasiment toujours adoptée, jusqu'à ces dernières années les modèles d'atmosphère étaient généralement formulés uniquement sous l'hypothèse anélastique. Récemment les modèles "fully compressible" ont vu le jour et le problème des ondes acoustiques est traité maintenant de manière numérique (Skamarock & Klemp, 2008). Nous aborderons ce sujet au §1.3.2.

1.1.4 Systèmes d'équations usuels

Nous avons pour le moment décrit les principes de conservation et les hypothèses aboutissant aux systèmes d'équations résolus par les modèles numériques. Dans l'océan les modèles sont basés sur les équations de Navier-Stokes sous l'approximation de Boussinesq et l'approximation hydrostatique (ainsi que l'approximation traditionnelle) pour donner le système suivant appelé *équations primitives* de l'océan

$$\frac{Du}{Dt} - 2\Omega_z v = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x} + \mathcal{F}(u) \quad (1.19)$$

$$\frac{Dv}{Dt} + 2\Omega_z u = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial y} + \mathcal{F}(v) \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial p'}{\partial z} = -g\rho' \quad (1.21)$$

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (1.22)$$

$$\frac{D\vartheta}{Dt} = \mathcal{F}(\vartheta) \quad (1.23)$$

$$\rho = \rho(\vartheta) \quad (1.24)$$

où $\vartheta = (T, S)$. En ce qui concerne l'atmosphère, les modèles actuellement utilisés et développés ne sont plus basés sur les équations primitives de l'atmosphère. En effet, ils intègrent

1. MODÉLISER L'OcéAN ET L'ATMOSPHERE

maintenant les équations d'Euler *élastiques non-hydrostatiques* suivantes (pour l'atmosphère sèche)

$$\frac{Du}{Dt} - 2\Omega_z v + 2\Omega_y w = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \mathcal{F}(u) \quad (1.25)$$

$$\frac{Dv}{Dt} + 2\Omega_z u - 2\Omega_x w = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \mathcal{F}(v) \quad (1.26)$$

$$\frac{Dw}{Dt} + 2\Omega_x v - 2\Omega_y u = -\frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial p}{\partial z} + g\rho \right] + \mathcal{F}(w) \quad (1.27)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho(\nabla \cdot \vec{U}) = 0 \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial \rho \theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \theta \vec{U}) = \rho \mathcal{F}(\theta) \quad (1.29)$$

$$p = p_0 \left(\frac{R\rho\theta}{p_0} \right)^\gamma \quad (1.30)$$

Un certain nombre d'études mathématiques ont été menées sur les équations primitives. Citons par exemple Sukhonosov (1981), Lions *et al.* (1992a)-(1992b). Ces différents travaux visent à montrer le caractère bien posé du système des équations primitives (sous certaines hypothèses simplificatrices) en s'inspirant des méthodes usuelles utilisées sur les équations de Navier-Stokes. Cependant l'hypothèse hydrostatique implique que la vitesse verticale devient une variable diagnostique pour les équations primitives alors que c'est une variable prognostique pour Navier-Stokes : c'est un point de difficulté supplémentaire qui rend les deux problèmes différents. Une revue détaillée des différents aspects mathématiques liés à l'étude des équations primitives est faite dans Petcu *et al.* (2008).

1.1.5 Conditions limites et conditions initiales

Les systèmes d'équations (1.19)-(1.24) et (1.25)-(1.30) doivent être complétés par des conditions limites et initiales adéquates.

Conditions initiales

La détermination des conditions initiales est plus ou moins critique suivant l'étude que l'on souhaite mener. Dans l'atmosphère, des conditions initiales tridimensionnelles sont requises pour les composantes horizontales du vent, ainsi que pour la température potentielle et l'humidité relative. Dans l'océan, de manière similaire, les courants ainsi que la salinité et

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

la température doivent être spécifiés.

Un nombre relativement important de données grandes échelles de type réanalyses, qui peuvent être vues comme des atlas historiques des océans et de l'atmosphère, sont disponibles et distribuées notamment par le NCEP¹, l'ECMWF² ou encore le groupe ECCO³. En général ces données sont interpolées sur le domaine local de calcul afin que l'état initial ne soit pas trop éloigné de la réalité. Comme la dynamique s'ajuste très rapidement dans l'océan, comparativement à la thermodynamique, il est commun de partir de vitesses initiales de courants nulles. Ensuite, une fois les données interpolées pour fournir la condition initiale au modèle, on réalise un *spin-up* du modèle de plusieurs mois ou années afin d'équilibrer la dynamique et la thermodynamique. Ce type de stratégie d'initialisation est envisageable pour des simulations longues durées climatiques ou pour re-simuler des scénarios du passé.

Dans le cas de prévisions (à court terme ou saisonnière) la notion d'état initial "pas trop éloigné" de la réalité prend tout son sens. Il est essentiel de partir d'un état atmosphérique ou océanique qui soit le plus proche possible de l'état réel observé. Dans ce cas une simple interpolation de données grande échelle n'est plus suffisante. En effet, l'état interpolé n'est pas un état réaliste car l'interpolation crée des structures non physiques. Dans ce cas le risque est la propagation d'ondes non physiques dans le domaine de calcul, qui peuvent par exemple provoquer des précipitations artificielles ou donner des comportements totalement irréalistes. De plus les erreurs dans les conditions initiales iront partiellement en s'amplifiant lors de la prévision et celle-ci pourra diverger de la réalité. Pour tenter de répondre à ce genre de problèmes, plusieurs méthodes mathématiques et numériques ont été proposées, comme l'utilisation de filtre digitaux (Lynch & Huang, 1992) ou de méthodes variationnelles de type 4DVar (Le Dimet, 1982). Cette dernière méthode est probablement la plus aboutie et elle vise à fournir une estimation de l'état optimal de l'atmosphère (ou de l'océan) à l'instant initial.

A titre anecdotique, il est notamment intéressant de remarquer qu'historiquement la première tentative de prévision météorologique, faite par Richardson en 1922, s'est avérée

¹National Center for Environmental Prediction : <http://www.ncep.noaa.gov/>

²European Centre for Medium-Range Weather Forecasts : <http://www.ecmwf.int/>

³Estimating the Circulation and Climate of the Ocean : <http://ecco.jpl.nasa.gov/>

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

désastreuse justement à cause de ses données initiales (ainsi que d'un pas de temps inadapté). En effet, les données initiales n'étaient pas équilibrées, ce qui a provoqué le développement d'ondes de gravité qui sont venues altérer la prévision. Là où la prévision initiale de Richardson prévoyait une variation (irréaliste) de pression de 145hPa sur 6 heures, la même prévision avec des données initiales équilibrées prévoit une variation de 0.9hPa. Ce constat illustre bien l'importance de la qualité de la condition initiale pour la prévision numérique.

Conditions limites

Nous nous intéressons ici aux conditions limites aux frontières physiques du domaine. L'océan est borné latéralement par des lignes de côte, par la topographie de fond (la bathymétrie) et par l'interface air-mer à son sommet. Nous ne traiterons pas ici le cas de la glace de mer. De son côté l'atmosphère n'est bornée physiquement qu'au bas du domaine par la topographie ou la surface de l'océan. Ceci revient à traiter trois catégories de conditions : les conditions de surface ainsi que celles latérales et de fond dans l'océan.

- *Conditions de surface* : à l'interface air-mer la continuité de la pression est imposée. De plus l'océan et l'atmosphère échangent des flux de quantité de mouvement, de chaleur et d'eau douce. Ces flux sont bien sûr de toute première importance dans le cadre du couplage océan-atmosphère qui nous intéresse. Nous présenterons plus en détails leur calcul et leurs caractéristiques dans le chapitre suivant. En ce qui concerne l'atmosphère au dessus des surfaces continentales, des flux de quantité de mouvement, de chaleur et d'humidité sont également imposés.
- *Conditions au fond* : les flux à travers le fond des océans sont généralement négligés. On impose donc une condition de non-flux, bien que le flux de chaleur géothermique ne soit pas toujours négligeable. En ce qui concerne la quantité de mouvement, on spécifie de même $\vec{U} \cdot \vec{n} = 0$.
- *Conditions latérales* : le long des côtes une condition de non flux $\vec{U} \cdot \vec{n} = 0$ est généralement prescrite. Cependant il peut y avoir localement à l'embouchure des principales rivières un flux d'eau douce. Ce flux est important si l'on considère des simulations climatiques à long terme pour avoir une représentation plus précise du cycle de l'eau. A la condition de non flux on peut ajouter une condition de glissement ($\partial u / \partial n = 0$)

1.1 Equations primitives et équations d'Euler

ou de non-glissement ($u = 0$) qui s'avère nécessaire pour le calcul de termes d'ordre élevé.

Nous avons ici abordé la spécification des conditions limites uniquement pour des frontières physiques. Cependant des frontières artificielles peuvent aussi être considérées. En effet, pour des raisons de coût de calcul, on est souvent amené à limiter la taille des domaines de calcul à une zone géographique d'intérêt. Les frontières "fluides" de ce domaine sont alors des frontières dites ouvertes. Ceci ne concerne pas seulement les frontières latérales mais aussi le toit du domaine de calcul dans l'atmosphère. Nous aborderons ce problème de frontières ouvertes plus loin dans ce manuscrit, lorsque les aspects numériques des modèles auront été introduits.

1.2 Turbulence et décomposition de Reynolds

Nous avons jusqu'à maintenant introduit un certain nombre de simplifications au système de Navier-Stokes initial. Cependant, après ces simplifications, de petites échelles sont toujours présentes, ceci étant lié au caractère fondamentalement turbulent des fluides considérés. La turbulence est une partie intrinsèque de la circulation océanique et atmosphérique, il est donc nécessaire de la quantifier. Du fait de son caractère aléatoire la turbulence est généralement étudiée par des approches statistiques. Cela correspond à séparer la partie turbulente et non turbulente de la circulation en utilisant la moyenne comme opérateur statistique.

1.2.1 Séparation d'échelles

Considérons l'équation de conservation (non-linéaire) suivante pour une grandeur scalaire (ou vectorielle) X

$$\frac{\partial X}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{U}X) = \mathcal{F}(X) \quad (1.31)$$

Considérons de plus un opérateur de séparation d'échelles qui fera la distinction entre les échelles résolues et non résolues de l'écoulement. Si l'on note \mathcal{S} cet opérateur (que nous ne définissons pas volontairement pour le moment), on décompose X et $\vec{U} = (u, v, w)^t$ de la manière suivante

$$X = \mathcal{S}(X) + X' \quad \vec{U} = \mathcal{S}(\vec{U}) + \vec{U}' \quad (1.32)$$

chacun des termes variant en temps et en espace. L'opérateur \mathcal{S} éliminera les contributions des termes non résolus uniquement pour les termes linéaires des équations (1.19)-(1.24) et (1.25)-(1.30), par exemple pour le terme de Coriolis ou l'équation de continuité. Le problème est tout autre pour les termes non-linéaires associés à l'advection. En effet, l'advection par une vitesse \vec{U} se décomposera sous la forme

$$\nabla \cdot (\vec{U}X) = \nabla \cdot (\mathcal{S}(\vec{U})\mathcal{S}(X)) + \nabla \cdot (\mathcal{S}(\vec{U})X') + \nabla \cdot (\vec{U}'\mathcal{S}(X)) + \nabla \cdot (\vec{U}'X') \quad (1.33)$$

Les non-linéarités imposent donc une interaction entre les échelles résolues et non résolues. Nous devons maintenant expliciter l'opérateur de séparation d'échelles. On peut définir deux classes d'opérateurs couramment utilisés :

- Une première classe est basée sur une approche statistique de la circulation. La partie résolue se limite donc à une description statistique. Ceci correspond à la décomposition

1.2 Turbulence et décomposition de Reynolds

de Reynolds et conduit au système communément appelé RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*).

- Une seconde classe est basée sur une séparation d'échelle entre les phénomènes contenant le plus d'énergie et les petites échelles responsables de la dissipation. Cela correspond à un filtre passe-bas dans l'espace des nombres d'ondes. Ce type de séparation correspond à une approche dite LES (*Large Eddy Simulation*), introduite par Smagorinsky (1963).

Enfin nous pouvons mentionner une approche supplémentaire qui consiste à représenter de manière déterministe toutes les échelles turbulentes : on parle de DNS (*Direct Numerical Simulations*). La figure 1.1 illustre les différences entre ces approches. Les modèles numériques réalistes sont basés sur la décomposition de Reynolds, donc sur une description statistique de la circulation.

1.2.2 Décomposition de Reynolds

En notant $\mathcal{S} = \langle \cdot \rangle$, il nous faut définir l'opérateur statistique $\langle \cdot \rangle$ utilisé pour séparer les échelles résolues et non résolues. De manière générale on requiert que l'opérateur choisi satisfasse les "conditions de Reynolds"

$$\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle \quad \langle a f \rangle = a \langle f \rangle \quad \left\langle \frac{\partial f}{\partial s} \right\rangle = \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial s} \quad \langle \langle f \rangle g \rangle = \langle f \rangle \langle g \rangle \quad (1.34)$$

où f et g sont deux fonctions, a une constante et s une coordonnée spatiale ou temporelle. Nous pouvons ajouter deux propriétés plus classiques à savoir $\langle a \rangle = a$ (la conservation des constantes) et $\langle \langle f \rangle \rangle = \langle f \rangle$. Les propriétés (1.34) correspondent à des propriétés de linéarité, associativité et commutation avec les dérivées (en espace et en temps). Si l'on applique ces règles au terme d'advection (1.33) celui s'écrit

$$\left\langle \nabla \cdot (\vec{U} X) \right\rangle = \nabla \cdot \left(\left\langle \vec{U} \right\rangle \langle X \rangle \right) + \nabla \cdot \left\langle \vec{U}' X' \right\rangle + D(\vec{U}, X) \quad (1.35)$$

Cette égalité met en avant deux contributions principales : l'advection de $\langle X \rangle$ par la partie résolue de l'écoulement et la divergence de la moyenne des produits de fluctuations non résolues. Comme mentionné précédemment, les phénomènes hautes fréquences (turbulents) interagissent donc avec la partie résolue des équations du fait des non-linéarités. En pratique, contrairement à la propriété classique $\left\langle \vec{U}' \right\rangle = \langle X' \rangle = 0$, dans le cadre d'un modèle numérique la propriété $\mathcal{S}(X') = \mathcal{S}(\vec{U}') = 0$ n'est pas vérifiée car la moyenne des échelles non résolues

1. MODÉLISER L'OcéAN ET L'ATMOSPHERE

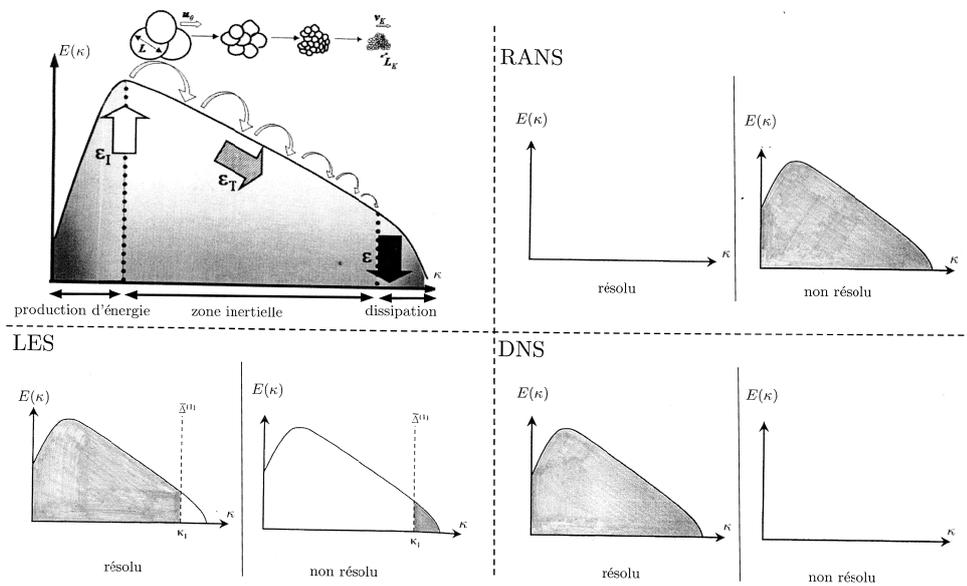


Fig. 1.1: Spectres d'énergie résolue et non résolue dans des simulations RANS, DNS et LES, pour une circulation turbulente. Le schéma en haut à gauche représente la cascade d'énergie. On remarque que pour une simulation de type RANS les échelles turbulentes (fixées de manière arbitraire ici) ne sont pas résolues alors qu'elles le sont toutes pour des simulations DNS. Avec une approche LES on résout explicitement une grande partie du spectre mais des échelles demeurent non résolues (Source : Sagaud *et al.*, 2006).

1.2 Turbulence et décomposition de Reynolds

n'est en général pas nulle (du fait de la troncature en espace). Ceci signifie que des termes non nuls supplémentaires doivent être présents dans (1.35), ces termes peuvent être vus comme de la diffusion numérique et seront omis par la suite. Avec ce type d'opérateur de séparation d'échelles l'équation de conservation (1.31) devient

$$\frac{\partial \langle X \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \vec{U} \rangle \langle X \rangle) = \mathcal{F}(\langle X \rangle) - \nabla \cdot (\vec{U}' X') \quad (1.36)$$

L'opérateur $\langle . \rangle$ est choisi classiquement égal à une moyenne temporelle sur une certaine période de temps ΔT , $\langle X \rangle(t_i) = \frac{1}{\Delta T} \int_{t_i - \Delta T/2}^{t_i + \Delta T/2} X(t) dt$. Cet opérateur vérifie les conditions de Reynolds (1.34). La décomposition de Reynolds correspondante est schématisée sur la figure 1.2 où les variations temporelles de la vitesse du vent sont représentées avec des déviations autour de la valeur moyenne qui correspondent, par exemple, à des rafales de vent. Le moyennage temporel éliminera a priori les phénomènes caractérisés par des échelles de temps beaucoup plus petites que ΔT . Il faut que le temps caractéristique des processus que l'on souhaite étudier soit plus grand que ΔT afin qu'ils soient résolus explicitement. Si ce n'est pas le cas, leur action devra être intégrée via les termes associés à la turbulence.

A titre d'illustration, les modèles numériques globaux pour des études climatiques utilisent un pas de temps (de l'ordre de 30 à 90 minutes) qui coïncide bien avec le saut dans le spectre observé sur la figure 1.2. Les mouvements à gauche du saut d'énergie correspondent à la circulation grande échelle alors que les échelles à droite correspondent à des petites échelles. Cela signifie que ce type de modèle résout explicitement de manière déterministe la circulation moyenne, tandis que les petites échelles, vues comme de la turbulence, ne sont pas modélisées directement.

Les remarques que nous avons faites jusqu'à maintenant au niveau temporel peuvent également être faites au niveau spatial. Et théoriquement si l'on se place dans une approche différences finies avec des mailles spatiales fixes en coordonnées eulériennes, l'opérateur de moyennage temporel défini précédemment peut s'étendre à un moyennage sur 4 dimensions (3 spatiales et 1 temporelle). Ainsi $\langle . \rangle$ correspondra à une moyenne temporelle sur une maille tridimensionnelle, ce qui explique qu'en pratique $\langle X' \rangle \neq \langle \vec{U}' \rangle \neq 0$.

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

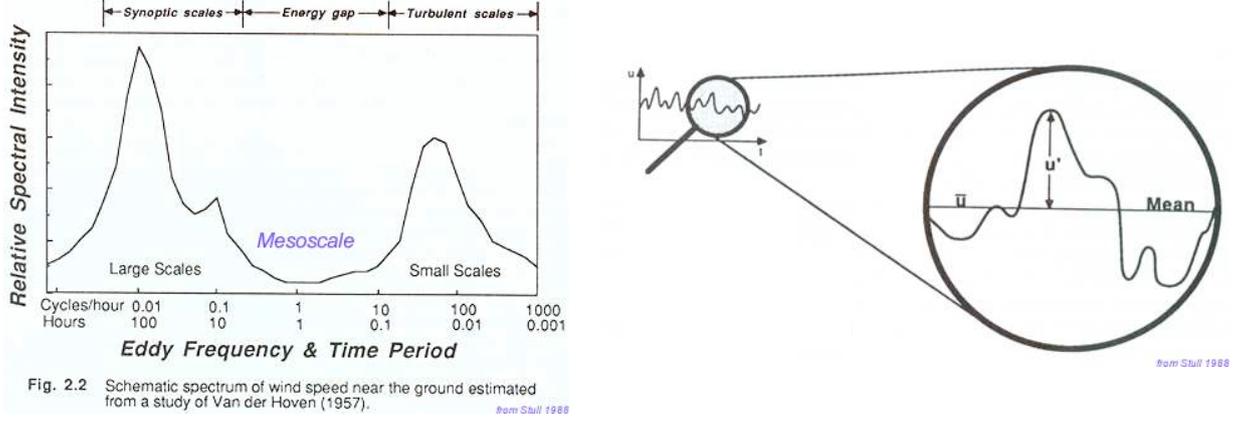


Fig. 1.2: La figure de gauche représente le spectre schématique de la vitesse du vent près du sol. La figure de droite représente une déviation u' typique de l'état moyen \bar{u} (Source : Stull, 1988).

1.2.3 Paramétrisation sous-maille

Du fait de la décomposition de Reynolds, un nouveau terme apparaît dans le membre de droite de (1.36). Celui-ci représente l'action du flux turbulent $\langle \vec{U}'X' \rangle$. Cette turbulence correspond à ce que l'on appelle les *échelles sous-mailles* et leurs effets sont paramétrisés par des modèles appelés *fermetures turbulentes*. En effet, on parle de fermeture turbulente car les termes supplémentaires $\langle \vec{U}'X' \rangle$ apparaissant dans les équations font que le nombre d'inconnues devient plus grand que le nombre d'équations. L'objectif est donc traditionnellement de paramétriser les termes $\langle \vec{U}'X' \rangle$ en fonction des valeurs moyennes $\langle X \rangle$ de l'écoulement pour fermer le système. En partant du constat que l'expérience montre que le flux turbulent est responsable d'une diffusion beaucoup plus efficace que la diffusion moléculaire, on peut relier, en première approximation, ces flux aux grandeurs moyennes par des expressions de la forme

$$\langle \vec{U}'X' \rangle = - \left(K_x \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial x}, K_y \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial y}, K_z \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial z} \right)^t \quad (1.37)$$

où K_x, K_y et K_z sont des fonctions de l'espace et du temps appelés coefficients de diffusion turbulente. Plus précisément ils sont appelés *viscosité turbulente* pour la dynamique et *dif-*

1.2 Turbulence et décomposition de Reynolds

fusivité turbulente pour les traceurs. Pour la plupart des applications, les termes de diffusion moléculaires sont négligeables devant la diffusion turbulente. Ce type de fermeture correspond à une fermeture d'ordre 1, voir Stull (1988) pour une revue détaillée des différents schémas de fermeture.

1.2.4 Remarques

Nous concluons cette section par quelques remarques générales sur les fermetures turbulentes. L'approche décrite ici, bien que théoriquement aisée à comprendre, est d'une très grande complexité à mettre en oeuvre, pour de nombreuses raisons.

1. Le saut dans le spectre de la figure 1.2 suggère qu'en théorie, suivant la valeur de ΔT , les modèles de fermeture turbulente doivent être adaptés car ils ne sont pas censés paramétriser les mêmes échelles. Des modèles adaptés pour des applications globales grande échelle ne le seront plus nécessairement pour des applications régionales haute résolution. A notre connaissance, le formalisme des modèles de fermeture n'est pas établi pour avoir une approche multi-résolution.
2. Il est parfois difficile de proposer une séparation claire entre ce qui est résolu explicitement et ce qui doit être paramétré. Par exemple, pour des résolutions horizontales inférieures à 8 km, les paramétrisations des cumulus tendent à calculer la contribution de certains phénomènes qui sont parfois parallèlement résolus explicitement par le modèle.
3. Enfin, d'un point de vue mathématique quelques problèmes se posent, comme mentionné dans Treguier (2005) par exemple. En effet il n'y a pas en pratique nécessairement convergence de la solution d'un modèle lorsque la résolution est augmentée alors que l'on pourrait espérer qu'avec une résolution de plus en plus fine les solutions soient de plus en plus proches. Comme suggéré plus haut, les schémas de fermeture sont différents suivant la résolution considérée, donc le membre de droite des équations où le terme $\langle \vec{U}'X' \rangle$ apparaît diffère. On ne résout donc plus les mêmes équations lorsque la résolution est modifiée et c'est pour cette raison qu'on ne peut pas espérer de convergence. Cette remarque est liée à l'absence de cette notion de convergence dans les schémas de fermeture. En effet, la plupart du temps, l'effet des paramétrisations ne tend pas nécessairement vers zéro lorsque le pas de maillage tend vers zéro. Malgré

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

le fait qu'il n'y ait pas de convergence des solutions numériques, la précision peut théoriquement être augmentée en incluant la physique nécessaire spécifique à chaque résolution.

L'extrême imprévisibilité des phénomènes turbulents rend la conception de paramétrisations très complexe. Cependant le développement de simulations de type DNS ou LES peut fournir une aide précieuse pour la conception de ces fermetures ainsi que le recours à des méthodes de contrôle optimal (Leredde *et al.*, 1999). Nous verrons dans le prochain chapitre des exemples précis de modèles de fermeture turbulente et nous nous intéresserons tout particulièrement aux flux verticaux $\langle w'X' \rangle$ avec $X = u, v, \theta, S$ ou q .

1.3 Les modèles numériques

Nous avons jusqu'à maintenant exposé les bases mathématiques des modèles de prévision de la circulation océanique et atmosphérique sous forme d'équations continues. Cependant comme les solutions analytiques des systèmes équations (1.19)-(1.24) et (1.25)-(1.30) ne sont pas connues, celles-ci doivent être approchées par un problème discret. Il faut donc procéder à la résolution numérique des équations primitives et des équations d'Euler, ce qui représente une tâche délicate. Le premier modèle aux équations primitives de l'océan a été proposé par Bryan & Cox (1968) et Bryan (1969). Ils ont été les deux pionniers de la modélisation numérique des océans, tous les modèles actuels étant basés de près ou de loin sur leur formulation (*Bryan-Cox-type ocean model*). Le premier modèle aux équations primitives de l'atmosphère date de 1965 par Smagorinsky *et al.* (1965).

Les challenges de la modélisation numérique sont nombreux et sont fondamentalement pluri-disciplinaires en faisant appel aux mathématiques appliquées, à la physique et à l'informatique. Le travail peut de plus apparaître sans fin car tout ajustement physique requiert des ajustements numériques en accord. L'objectif de cette section est de passer en revue, de manière non-exhaustive, certains aspects importants liés à la modélisation de l'atmosphère et de l'océan. Nous illustrerons enfin ce propos avec quelques exemples de modèles numériques couramment utilisés. Parmi les ouvrages de référence abordant le sujet nous pouvons citer Griffies (2004) ou Jacobson (2005).

1.3.1 Discrétisation des équations

Approche classique

La majorité des modèles numériques utilisent une discrétisation en différences et/ou volumes finis sur maillage structurés. Il y a plusieurs possibilités pour définir l'emplacement des différentes variables discrètes, comme introduit dans Arakawa (1966). Ces différentes possibilités sont représentées sur la figure 1.3 et correspondent à des grilles dites "de type A à E". Les avantages et inconvénients de ces grilles sont généralement évalués en terme de représentation des principales ondes (inertie-gravité, Kelvin, Rossby par exemple) sur un modèle simplifié de type *shallow-water* linéarisé. La "qualité" d'un schéma est liée à la manière dont chaque terme dans les équations de départ est discrétisé. En effet le fait que

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHÈRE

les différentes variables ne soient pas localisées aux mêmes points fait que le calcul de certains termes implique une interpolation spatiale. Par exemple sur les grilles de type A et B, le terme de Coriolis est évalué directement car u et v sont positionnés au même point. A contrario le calcul du gradient de pression et de l'équation de continuité requièrent l'usage de moyennes, ce qui altère le calcul de ces termes. Pour une grille de type C, seul le terme de Coriolis nécessite une interpolation et donc les ondes peu affectées par Coriolis sont bien représentées. Pour la grille de type D aucun terme n'est évalué directement. La grille de type E permet de calculer tous les termes sans calculer de moyennes, mais pose cependant problème pour la propagation des ondes car la projection 1D d'une grille E correspond à une grille de type A. Parmi ces grilles d'Arakawa, les grilles de type C sont les plus répandues aussi bien en météorologie qu'en océanographie. Cependant lorsque l'on considère des modèles globaux avec une résolution relativement grossière (supérieure au rayon de Rossby, i.e. $\approx 40\text{km}$ dans l'océan) les grilles de type B semblent plus adaptées (Kantha & Clayson, 1999). Le développement des ressources informatiques permet maintenant aux modèles globaux d'atteindre des résolutions plus fines et ainsi l'évolution vers des grilles de type C est naturelle. Il est également intéressant de remarquer que certaines propriétés de conservation (d'énergie ou d'entropie par exemple) sont plus ou moins aisées à assurer suivant les types de grille utilisés.

Approches "alternatives"

On entend principalement par approches "alternatives" les modèles spectraux pour la modélisation de l'atmosphère, très répandus auparavant mais de moins en moins ces dernières années (problème pour la parallélisation, oscillations de Gibbs etc ...). De plus des modèles basés sur des approches éléments finis sont actuellement en cours de conception pour la modélisation des océans. Les approches de type éléments finis sur des maillages non-structurés apparaissent intéressantes dans leur capacité à potentiellement mieux résoudre les lignes de côtes complexes. De plus la flexibilité de ces méthodes pour pouvoir augmenter localement la résolution et gérer des pentes dans la bathymétrie est intéressante. Cependant certains problèmes n'ont toujours pas de réponses claires. Citons par exemple celui des paramétrisations sous-maillages en présence de résolution horizontale variable (voir §1.2), ou encore des problèmes pour maintenir les équilibres hydrostatique et géostrophique (équilibre entre la force de Coriolis et le gradient de pression horizontal). Le recours à un schéma implicite en temps est quasiment obligatoire (un schéma explicite serait contraint par la plus

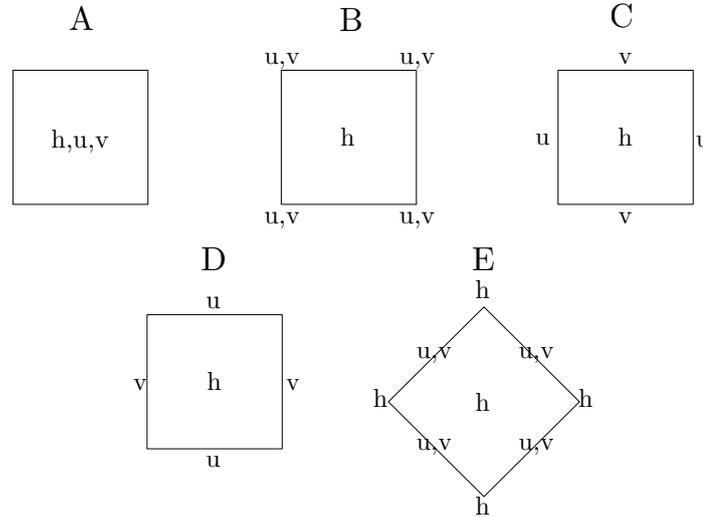


Fig. 1.3: Classification d'Arakawa (1966). Arrangements possibles des variables, u et v sont les composantes horizontales de la vitesse, h correspond aux quantités scalaires (traceurs, densité, pression, ...).

petite maille) ce qui altère la précision. De plus, le coût de calcul peut apparaître prohibitif et la parallélisation complexe. Il faut noter toutefois que récemment des progrès ont été effectués : voir White (2007) pour une revue et une *special issue* de *Ocean Dynamics* "unstructured ocean modelling" (à paraître).

1.3.2 Schémas numériques et décomposition en modes

Le développement des schémas numériques dans les modèles a toujours été orienté vers la recherche d'un compromis optimal entre précision des schémas et coût de calcul. Les études des propriétés des schémas numériques sont généralement menées sur la partie hyperbolique des équations primitives (respectivement d'Euler)

$$\frac{\partial X}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla X = 0 \quad (1.38)$$

considérée en 1D et en linéarisant autour d'une vitesse constante.

1. MODÉLISER L’OCÉAN ET L’ATMOSPHÈRE

Décomposition en modes

Les mouvements les plus rapides représentés dans un modèle numérique d’océan (sous l’approximation de Boussinesq) sont les ondes de gravité qui, par définition, correspondent aux ondes se propageant sur la surface libre d’un fluide soumis à la gravité. Dans un modèle d’atmosphère (élastique) les ondes rapides correspondent aux modes acoustiques, comme mentionné dans le §1.1.2. Dans les deux cas, si une discrétisation explicite en temps est choisie, le pas de temps Δt est soumis à une condition de stabilité de type CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) définie par

$$\Delta t \leq \frac{Cr\Delta x}{u_{\max}} \quad (1.39)$$

où Cr est le nombre de Courant, Δx le pas d’espace et u_{\max} correspond à la vitesse maximale attendue pendant la simulation. Le nombre de Courant dépend du schéma de discrétisation en temps choisi et du schéma en espace. Nous approfondirons cette notion dans le paragraphe suivant. D’après la relation (1.39) nous remarquons que le pas de temps est contraint par la vitesse maximum u_{\max} correspondant dans les modèles d’océan à la vitesse des ondes de gravité et dans les modèles d’atmosphère à la vitesse du son. Cependant le nombre de Mach (rapport de la vitesse locale d’un fluide sur la vitesse du son) de l’air vaut approximativement $1/3$ et est donc relativement faible. Ainsi il a été proposé d’utiliser une méthode dite de *splitting* qui revient à traiter séparément les modes acoustiques et les termes d’advection. Les termes d’advection sont traités à l’aide d’un schéma explicite en temps et les modes acoustiques sont soit traités implicitement (on parle de *split-implicit*), soit traités explicitement (*split-explicit*). Le même type de séparation est aussi généralement effectué dans les modèles d’océan en partant de l’observation que les modes les plus rapides sont essentiellement 2D. Pour éviter de contraindre le pas de temps du système tridimensionnel, les modes rapides 2D sont traités séparément de manière implicite ou explicite en temps. Le mode rapide 2D est traditionnellement appelé *mode barotrope* et le mode lent correspond au *mode barocline*. Il existe une alternative à cette décomposition barocline-barotrope : l’hypothèse du *toit rigide*, qui filtre les ondes de gravité. Toutefois celle-ci n’est plus employée actuellement. Nous ne traiterons pas ici le problème complexe de couplage entre les modes rapides et les modes lents.

Nous discutons maintenant brièvement les schémas temporels et d’advection usuels en modélisation. Il est important de noter, bien que nous les présentions séparément, que le

choix du schéma d'advection n'est pas indépendant du choix du schéma en temps, et c'est donc la qualité de la combinaison de ces deux schémas qui devra être évaluée.

Schémas temporels

Nous parlons dans un premier temps des schémas utilisés pour intégrer les modes dits "lents" dans l'océan et l'atmosphère. Le schéma en temps historiquement le plus répandu en dynamique des fluides géophysiques est le schéma "saute mouton" (*leapfrog*). Ce schéma est formellement d'ordre 2 mais possède un mode numérique qu'il est nécessaire de filtrer. Ceci est généralement fait en utilisant un filtre d'Asselin-Robert. Le schéma Leapfrog associé au filtre d'Asselin (LF-AR) est alors d'ordre 1. Malgré cela, ce type de schéma a été, et est toujours, extrêmement utilisé grâce à sa simplicité de mise en oeuvre et à son faible coût de calcul. Il est notamment très bien adapté pour des études climatiques (de l'atmosphère ou de l'océan), moyennant quelques modifications pour assurer la conservation des traceurs (Griffies *et al.*, 2001). Pour les modèles à plus haute résolution un certain nombre de schémas d'ordres plus élevés de type prédictor-correcteur basés sur Runge-Kutta (RK), Adams-Bashforth (AB) ou Adams-Moulton (AM) sont proposés dans Shchepetkin & McWilliams (2005) et Skamarock & Klemp (2008). Ceux-ci présentent un bon compromis entre précision et stabilité.

En ce qui concerne les modes rapides, lorsqu'une méthode de type *split-explicit* est adoptée, l'intégration en temps est généralement faite à l'aide d'un schéma (LF-AR) ou de type *forward-backward* (FB).

Schémas d'advection

Un des processus d'importance dans les modèles numériques est l'advection, notamment des traceurs. Les schémas d'advection peuvent être évalués sur des critères de type stabilité et précision mais d'autres propriétés sont aussi importantes. Par exemple, des propriétés additionnelles de préservation de la monotonie (décroissance de la variation totale) ou de positivité sont intéressantes. Les schémas couramment utilisés sont de type QUICK¹, FCT²,

¹Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics

²Flux Corrected Transport

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

TVD¹, MUSCL² ou MPDATA³. L'ordre de ces schémas est typiquement entre 1 et 3 pour les modèles d'océan et entre 2 et 6 pour les modèles d'atmosphère. Cette différence est due au fait que la présence de côtes dans l'océan rend complexe l'utilisation de schémas d'ordre élevé.

Contraintes de stabilité

Considérons ici, par exemple, un modèle d'atmosphère utilisant un schéma de type Runge-Kutta d'ordre 3 (RK3) de pas de temps Δt_a (en secondes) et un modèle d'océan avec un schéma de type prédicteur-correcteur (LF-AM3) de pas de temps Δt_o . Dans les deux cas les modes rapides sont traités avec un schéma de type (FB), de pas de temps respectifs $\Delta \tau_a$ et $\Delta \tau_o$. En supposant une vitesse maximale $u_{\max} = 100 m.s^{-1}$ dans l'atmosphère et un schéma d'ordre 5 en espace, on trouve (Skamarock *et al.*, 2005)

$$\Delta t_a = 6\Delta x_a \quad \Delta \tau_a = \frac{1}{5}\Delta t_a \quad (1.40)$$

où le pas de temps est exprimé en secondes et le pas d'espace en kilomètres. Dans l'océan avec un schéma d'ordre 3 en espace et un (LF-AM3) on obtient

$$\Delta t_o = 125\Delta x_o \quad \Delta \tau_o = \frac{1}{50}\Delta t_o \quad (1.41)$$

Nous remarquons donc une non-conformité en temps assez marquée entre les deux modèles : à résolution horizontale égale, le pas de temps du modèle atmosphérique sera nettement plus petit que celui du modèle océanique.

1.3.3 Choix de la coordonnée verticale

Lors de la construction d'un modèle le choix de la coordonnée verticale est relativement crucial. En effet, il affecte directement la formulation mais conditionne aussi les choix numériques. Pour les modèles d'océan, on distingue trois grandes classes de systèmes de coordonnées : les coordonnées "naturelles" z (ou *partial steps*) géopotentielles variant de 0 à la profondeur totale $H(x, y)$, la coordonnée σ dite de suivi de terrain, $\sigma = z/H(x, y)$ et

¹Total Variation Diminishing

²Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws

³Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm

1.3 Les modèles numériques

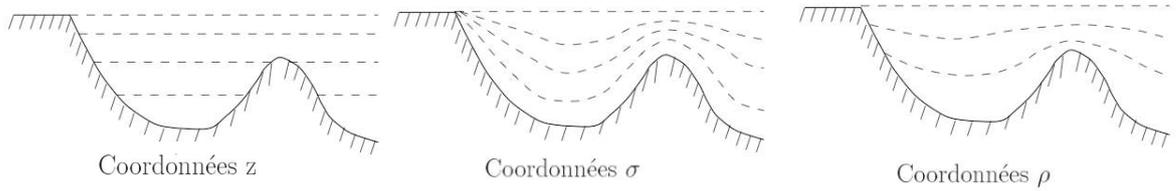


Fig. 1.4: Différents types de coordonnées verticales pour les modèles d’océan.

la coordonnée isopycnale ρ , correspondant aux surfaces de densité potentielle constante. Un quatrième choix consiste en une hybridation des trois, la *coordonnée hybride*. Ces différents types de coordonnées sont illustrés sur la figure 1.4. Chacune de ces trois catégories présente des avantages et des inconvénients. Les coordonnées σ assurent une bonne représentation de la topographie contrairement aux coordonnées ρ et z . Le calcul du gradient de pression horizontal exact pour les coordonnées z pose problème en coordonnées σ . Un dernier exemple est le transport diapycnal¹ non physique induit par la diffusion (purement numérique) des schémas pour les coordonnées σ et z . La coordonnée hybride qui vise à tirer les avantages de ces trois types de coordonnées n’est mise en oeuvre que dans un seul modèle et demeure en phase de développement. De plus nous pouvons mentionner une coordonnée p basée sur la pression qui devient naturelle lorsque l’hypothèse de Boussinesq est relâchée. En ce qui concerne les modèles d’atmosphère les coordonnées usuelles sont la coordonnée z , basées sur l’altitude, la coordonnée p et la coordonnée η basée sur une pression normalisée. La grande majorité des modèles utilise des coordonnées η liées à la pression hydrostatique (ou la masse), $\eta = \frac{p_h - p_{ht}}{p_{hs} - p_{ht}}$ où p_h est la composante hydrostatique de la pression, et, p_{hs} et p_{ht} correspondent à la pression respectivement à la surface et au toit du modèle. p_{ht} est supposée constante. η varie de manière monotone de 1 à la surface à 0 en haut du domaine.

Le choix de la coordonnée verticale doit se faire en fonction du type d’applications ou d’étude de processus envisagé.

¹à travers les isopycnes

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

Modèle	coordonnée verticale	mode barotrope	mode barocline
OPA/NEMO	z	LF-AR	LF-AR
ROMS-AGRIF	σ	FB généralisé	LF-AM3
HYCOM	<i>hybride</i>	LF-AR	LF-AR

Tab. 1.1: Exemple de choix de schémas temporels et de coordonnées verticales pour trois modèles numériques de l'océan.

1.3.4 Exemples

Nous avons jusqu'à maintenant, dans un but de clarté, omis de citer des exemples de modèles numériques. Les modèles développés par la communauté scientifique sont nombreux, aussi bien pour des études globales que régionales, et à des fins opérationnelles et de recherche. De manière quasi générale les modèles numériques de l'océan sont hydrostatiques, font l'hypothèse de Boussinesq et sont discrétisés sur des grille de type C. Ils se différencient notamment par le type de coordonnée verticale et le choix du schéma en temps pour intégrer les modes baroclines et barotropes.

Quelques exemples sont donnés dans le tableau 1.1 pour les modèles NEMO¹, ROMS² et HYCOM³. Nous présentons aussi quelques modèles numériques non-hydrostatiques de l'atmosphère, discrétisés en grille C, dans le tableau 1.2. Ces modèles sont WRF⁴, ARPS⁵ et Mésos-NH⁶. Il faut préciser que les différents choix au niveau numérique (et physique) effectués lors du développement d'un modèle sont liés aux applications envisagées. C'est pour cela qu'il n'y a pas "unicité" des modèles car la grande variété des applications possibles suggère la conception de différentes classes de modèles.

¹Nucleus for European Modelling of the Ocean : <http://www.locean-ipsl.upmc.fr/NEMO/>

²Regional Ocean Modelling System : <http://roms.mpl.ird.fr/>

³HYbrid Coordinate Ocean Model : <http://hycom.rsmas.miami.edu/>

⁴Weather Research and Forecasting : <http://www.wrf-model.org/index.php>

⁵Advanced Regional Prediction System : <http://www.caps.ou.edu/ARPS/>

⁶modèle MESO-échelle Non-Hydrostatique : <http://mesonh.aero.obs-mip.fr/mesonh/>

1.3 Les modèles numériques

Modèle	coordonnée verticale	filtrage	modes lents	modes acoustiques
WRF	η	compressible	RK3	FB
MESONH	z normalisé	anélastique	LF-AR	-
ARPS	η	compressible	LF-AR	FB

Tab. 1.2: Exemple de choix de schémas temporels, de filtrage des ondes acoustiques et de coordonnées verticales pour trois modèles numériques (régionaux) de l'atmosphère.

1. MODÉLISER L'OCÉAN ET L'ATMOSPHERE

Nous avons dans ce premier chapitre introduit les bases des modèles numériques de prévision de l'océan et de l'atmosphère. L'objectif était de mettre l'accent sur la complexité de la mise en oeuvre de ce type de modèle. Cette complexité provient entre autre du caractère fondamentalement multi-échelle (en espace et en temps) des processus en présence. Cette représentation nécessite la mise au point de techniques numériques appropriées en accord avec les processus physiques que l'on souhaite représenter. Tous ces éléments expliquent le temps conséquent (de l'ordre de 5 à 10 ans) nécessaire au développement de modèles numériques. Il est ainsi important dans le cadre de notre étude de proposer des techniques minimisant les modifications à apporter aux codes existant pour que celles-ci présentent un intérêt pour les modélisateurs. L'autre point important à souligner est que pour être totalement consistant, les aspects physiques inhérents aux codes numériques doivent être considérés. Cette partie introductive était donc nécessaire car, de notre point de vue, dans le cadre d'un couplage océan-atmosphère il est important de ne pas considérer les deux modèles en présence seulement comme des boîtes noires échangeant des flux.

Nous avons brièvement mentionné dans ce chapitre les conditions limites des systèmes d'équations en présence. A l'interface air-mer les modèles numériques sont forcés par des flux. Ces flux de surface ont notamment des composantes turbulentes $\langle w'X' \rangle_0$ qu'il faut paramétriser. Celles-ci jouent un grand rôle dès que l'on traite le problème du couplage océan-atmosphère. Dans le prochain chapitre nous introduirons la manière de déterminer les termes $\langle w'X' \rangle_0$. Pour cela nous procéderons à une description des couches limites turbulentes près de l'interface air-mer. Plus généralement l'objectif sera d'introduire les schémas de paramétrisation utiles pour notre étude.

2

Couches limites et flux air-mer

Sommaire

2.1	Structure verticale et notion de stabilité statique	46
2.2	Description de la couche limite de surface	49
2.2.1	Objectifs	49
2.2.2	Equations descriptives de la CLS	50
2.2.3	Hypothèse de couche à flux constants	51
2.2.4	Analyse dimensionnelle	52
2.2.5	Formulation <i>bulk</i>	56
2.2.6	Prise en compte de l'humidité	57
2.2.7	Calcul pratique des flux turbulents	58
2.3	Calcul des flux air-mer	60
2.3.1	Les processus physiques à l'interface air-mer	60
2.3.2	Les algorithmes de calcul	62
2.4	Paramétrisation des couches limites turbulentes	68

La couche limite atmosphérique (CLA) constitue la zone de transition entre la surface de l'océan et l'atmosphère libre. Par définition, elle correspond à la partie inférieure de l'atmosphère directement soumise à l'influence de la surface. La même description vaut aussi pour l'océan où une couche limite océanique (CLO) fait le lien entre l'océan profond et la surface. L'étude de ces couches limites est évidemment incontournable dès que l'on s'intéresse aux flux échangés entre l'océan et l'atmosphère. Leur extension verticale va de la surface à quelques centaines de mètres d'altitude dans l'atmosphère et à quelques dizaines de mètres

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

de profondeur dans l'océan. Cette extension dépend directement de tous les paramètres météorologiques (vent, température, humidité). La CLA possède des propriétés particulières dans ses premiers mètres qui correspondent à une zone que l'on appelle la couche limite de surface (CLS). Les distributions verticales du vent, de la température et de l'humidité sont spécifiques dans la CLS. Son épaisseur est typiquement de quelques dizaines de mètres, dans lesquelles des grandeurs physiques sont échangées entre la surface de l'océan et l'atmosphère.

La CLA et la CLO sont, de manière permanente, influencées par la turbulence, ce qui les rend particulièrement complexes à étudier. L'objectif de ce chapitre est d'introduire les principaux éléments de description et de quantification des phénomènes de couche limite à l'interface océan-atmosphère. En nous appuyant sur cette description nous décrirons ensuite les techniques usuelles de calcul des flux air-mer. Nous présenterons notamment les difficultés et incertitudes inhérentes à ce genre de calcul. Enfin nous introduirons quelques schémas usuels de paramétrisation des CLA et CLO.

2.1 Structure verticale et notion de stabilité statique

Le comportement de la CLA dépend directement des caractéristiques locales à l'interface air-mer et des phénomènes à grande échelle (échelle synoptique). En effet, à la surface, la vitesse du vent est égale à la vitesse de déplacement de l'océan, alors qu'au sommet de la CLA, elle correspond au vent géostrophique, dépendant des gradients de pression horizontaux et de la force de Coriolis. Ces remarques impliquent donc qu'il y a cisaillement du vent sur l'épaisseur de la CLA.

En ce qui concerne l'évolution de température, elle peut être utilisée pour définir différents états thermiques de la CLA. On distingue habituellement trois états :

- la CLA *neutre* : la température de surface de l'océan est égale à la température potentielle de l'air.
- la CLA *stable* : la température de surface de l'océan est moins élevée que la température potentielle de l'air (l'air étant ainsi plus dense dans les basses couches qu'au dessus).
- la CLA *instable* : la température de surface est plus élevée que la température potentielle de l'air (les basses couches étant alors moins denses que celles supérieures, créant des mouvements convectifs pour rétablir un état d'équilibre).

2.1 Structure verticale et notion de stabilité statique

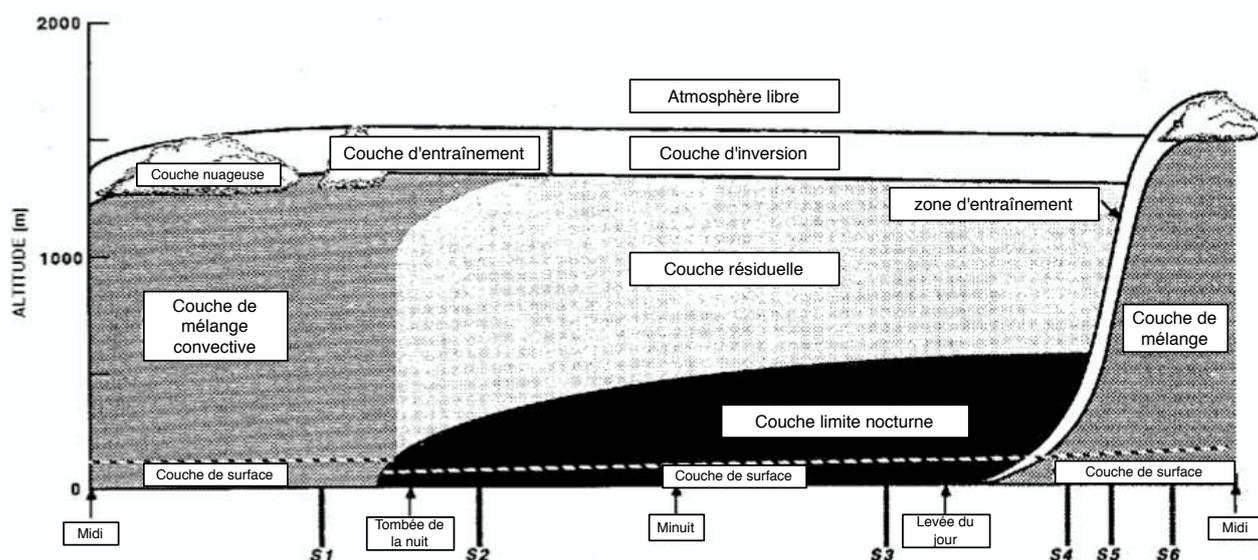


Fig. 2.1: Evolution journalière de la structure de la CLA (Source : Stull, 1988).

Par souci de clarté nous ne prenons pas en compte l'humidité (agissant sur la densité) dans cette classification. La température à la surface de l'océan étant essentiellement sensible au flux solaire la structure de la CLA va perpétuellement évoluer au cours de la journée entre des états stables et instables comme décrit par la figure 2.1. Dans un état instable, la CLA demeure (ou devient) turbulente, alors que dans un état stable elle a tendance à devenir laminaire ou moins turbulente.

D'après les remarques précédentes nous observons donc que le comportement de la CLA (pour une atmosphère sèche) est régi par un mécanisme dynamique, dépendant de la distribution de vitesse du fluide, et par un mécanisme thermique, lié à la distribution de température.

Il faut de plus noter que la CLA possède des propriétés particulières dans ses premiers mètres correspondant à la CLS. En effet, suffisamment proche de la surface, la force de Corio-

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

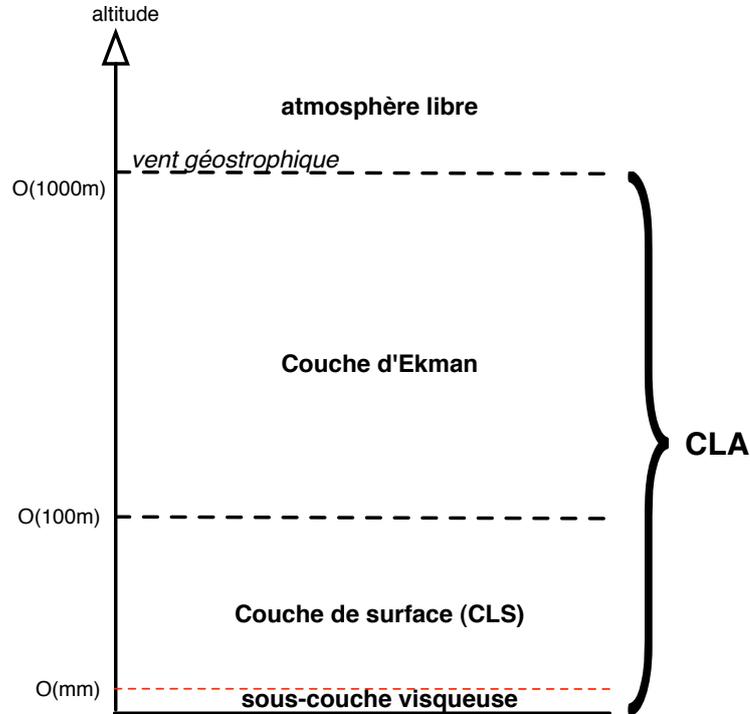


Fig. 2.2: Structure verticale de la CLA. Généralement l'épaisseur de la CLS correspond à 10% de la hauteur totale de la couche limite.

lis et le gradient horizontal de pression peuvent être considérés négligeables devant les forces de frottements. Son épaisseur est typiquement de quelques dizaines de mètres. Notons de plus qu'à proximité de l'interface air-mer (les premiers millimètres), il est possible de définir une couche supplémentaire dans laquelle les échanges énergétiques entre l'océan et l'atmosphère dépendent principalement des propriétés moléculaires de l'air : c'est la sous-couche visqueuse. La structure verticale de la CLA peut donc être schématiquement représentée par la figure 2.2 où la *couche d'Ekman* correspond à la couche de mélange où la force de Coriolis devient comparable aux forces de frottement au sol.

Par la suite, dans un premier temps, nous étudierons les équations descriptives de la CLS, sur lesquelles une analyse dimensionnelle et la théorie de *Monin-Obukhov* seront appliquées. Nous expliciterons ensuite le calcul des flux dans la CLS au-dessus de l'océan et enfin nous considérons les méthodes de paramétrisation de la CLO et la CLA dans leur intégralité.

2.2 Description de la couche limite de surface

2.2.1 Objectifs

Cette section a pour objectif d'introduire les fondements physiques et les méthodologies sur lesquelles la description de la CLS est basée. Elle n'est pas indispensable à la compréhension globale du reste du manuscrit. Nous avons cependant jugé nécessaire d'ajouter les détails du calcul car cela permet de bien se rendre compte du degré d'approximation lié aux formules d'estimation des flux air-mer (formules *bulk*). De plus les différentes étapes sont généralement présentées de manière très succinctes, sans forcément en préciser toutes les hypothèses. Nous en donnons dans les quelques lignes qui suivent les éléments essentiels qui permettent pour une lecture "rapide" de passer directement à la section 2.3. Le lecteur intéressé trouvera quant à lui tous les détails dans les sous-sections 2.2.2 à 2.2.7.

Résumé des §2.2.2 à 2.2.7

L'objectif est de proposer une formulation des flux turbulents $\langle X'w' \rangle$ dans la CLS au dessus de la mer.

1. Tout d'abord, à partir du système complet des équations descriptives de l'atmosphère, nous procédons à des hypothèses simplificatrices : quasi-stationnarité, homogénéité horizontale, hydrostaticité, absence de gradient de pression et d'effets dus à la force de Coriolis. Grâce à ces hypothèses nous trouvons que les flux turbulents dans la CLS peuvent être considérés comme constants : $\langle X'w' \rangle|_{CLS}(z) = \langle X'w' \rangle_0$. Ces étapes sont décrites dans les §2.2.2 et §2.2.3.
2. Il convient ensuite d'exprimer le terme $\langle X'w' \rangle_0$ en fonction des grandeurs moyennes de l'écoulement pour fermer le système. Une fermeture d'ordre 0 de type théorie de similitude est utilisée : elle correspond à la théorie de Monin-Obukhov. Celle-ci est basée sur une analyse dimensionnelle présentée dans le §2.2.4.
3. Il découle de l'analyse précédente des expressions permettant d'exprimer les flux turbulents à l'interface air-mer. Les flux $\langle X'w' \rangle_0$ dans la couche limite sont calculés en faisant la différence entre les variables atmosphériques prises au niveau vertical le plus proche de la surface et les variables océaniques également calculées près de l'interface air-mer, comme le décrivent les équations (2.24) et (2.25). Cette différence est ensuite multipliée par un coefficient d'échange défini par (2.26).

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

4. Les §2.2.6 et §2.2.7 fournissent des compléments concernant la prise en compte de l'humidité et le calcul pratique des flux pour forcer les modèles numériques.

2.2.2 Equations descriptives de la CLS

Afin de décrire le comportement de l'écoulement dans la CLS nous repartons des équations d'évolution des quantités $\langle \vec{U} \rangle$ et $\langle \theta \rangle$ issus de la décomposition de Reynolds (voir §1.2.2) sous l'hypothèse d'incompressibilité et d'hydrostaticité. Nous prenons en compte dans ces équations les effets moléculaires et un flux radiatif de chaleur \mathcal{R} correspondant à un terme source (non turbulent). Ainsi

$$\mathcal{F}(\langle \vec{U} \rangle) = -\nu \nabla^2 \cdot \langle \vec{U} \rangle \quad \mathcal{F}(\langle \theta \rangle) = -\nu_\theta \nabla^2 \cdot \langle \theta \rangle + \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial z} \quad (2.1)$$

où ν et ν_θ sont des coefficients de diffusion moléculaire et ρc_p correspond à la capacité thermique de l'air. Pour l'étude de la CLS un certain nombre d'hypothèses supplémentaires sont faites :

- *homogénéité horizontale* : les paramètres moyens sont supposés indépendants des coordonnées horizontales (à l'exception de la géostrophie). Cette hypothèse implique que l'équation de continuité se résume à $\frac{\partial \langle w \rangle}{\partial z} = 0$, qui conjointement à l'hypothèse hydrostatique faite dans la CLS donne

$$\langle w \rangle = 0 \quad (2.2)$$

- *quasi-stationnarité* : au voisinage de l'interface air-mer, l'écoulement de l'air est supposé quasi-stationnaire (sur une échelle de temps à déterminer). Les composantes horizontales du vent vérifient alors dans la CLS les équations suivantes

$$f(\langle v \rangle - v_g) - \frac{\partial}{\partial z} \left[\langle u'w' \rangle + \nu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \right] = 0 \quad (2.3)$$

$$-f(\langle u \rangle - u_g) - \frac{\partial}{\partial z} \left[\langle v'w' \rangle + \nu \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial z} \right] = 0 \quad (2.4)$$

où u_g et v_g sont les composantes du vent géostrophique définis par les équilibres $f v_g = \rho^{-1} \partial \langle p \rangle / \partial x$ et $f u_g = -\rho^{-1} \partial \langle p \rangle / \partial y$, avec f le paramètre de Coriolis. Ceci montre que sous les hypothèses précédentes lorsque l'on est en dehors de la CLA (i.e. $\langle u'w' \rangle = \langle v'w' \rangle = 0$) et que l'on néglige les termes moléculaires, le vent est géostrophique ($\langle v \rangle = v_g$ et $\langle u \rangle = u_g$) comme nous l'avons mentionné sur la figure 2.2.

2.2 Description de la couche limite de surface

La température potentielle satisfait

$$\frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left[\langle \theta' w' \rangle + \nu \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} \right] = 0 \quad (2.5)$$

L'hypothèse d'homogénéité horizontale représente probablement l'hypothèse la plus forte, car elle suppose l'absence de fronts dans l'atmosphère. En plus des équations pour \vec{U} et θ données précédemment nous ajoutons au système une équation de conservation pour l'énergie cinétique turbulente $\langle e \rangle$ définie par $e = \frac{1}{2} (\langle u'u' \rangle + \langle v'v' \rangle + \langle w'w' \rangle)$. On trouve, sous les hypothèses de la CLS, que l'énergie cinétique turbulente vérifie l'équation (Stull, 1988)

$$-\frac{\partial \langle w'e' \rangle}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\langle p'w' \rangle}{\rho} - \nu \frac{\partial \langle e \rangle}{\partial z} \right) - \left(\langle u'w' \rangle \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} + \langle v'w' \rangle \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial z} \right) + \beta \langle \theta'w' \rangle - \varepsilon = 0 \quad (2.6)$$

où $\beta \langle \theta'w' \rangle$ correspond à un terme de flottabilité, $\beta = \frac{g}{\langle \theta \rangle}$. ε définit le taux de dissipation moléculaire (visqueux). Ce terme est donc maximal près de l'interface air-mer où se trouve la sous-couche visqueuse que nous avons introduite auparavant. Le système formé de l'équation de continuité (2.2) et des équations de conservation (2.3), (2.4) et (2.5) correspond au système descriptif de la CLS sèche. Ce système contient des termes turbulents du type $\langle X'w' \rangle (z)$ qu'il va falloir paramétriser pour fermer le système. Pour ce faire il convient de faire quelques hypothèses simplificatrices supplémentaires.

2.2.3 Hypothèse de couche à flux constants

Dans la suite, pour simplifier quelque peu l'étude, nous choisissons d'aligner le repère avec le vent afin d'annuler la composante v de la vitesse. En l'absence de flux radiatif et en considérant que la force de Coriolis et le gradient de pression sont négligeables, le système descriptif de la CLS devient

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[\langle u'w' \rangle + \nu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \right] = 0 \quad \frac{\partial}{\partial z} \left[\langle \theta'w' \rangle + \nu \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} \right] = 0 \quad (2.7)$$

Ces relations montrent clairement que grâce aux simplifications précédentes les différents flux turbulents deviennent indépendants de la coordonnée z . Nous noterons τ le flux constant de quantité de mouvement et Q_0 le flux constant de chaleur à la surface. Nous aurons donc

$$-\langle u'w' \rangle - \nu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = \frac{\tau}{\rho} \quad -\langle \theta'w' \rangle - \nu \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} = \frac{Q_H}{\rho c_p} = Q_0 \quad (2.8)$$

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

où Q_H est le flux de *chaleur sensible*. C'est ce que l'on nomme l'hypothèse de couche à "flux constant". Ceci n'est qu'un cas idéalisé car en réalité les flux varient avec l'altitude. Cette hypothèse est discutable, comme suggéré par Large (2005) notamment, car une telle couche n'existe pas en pratique en tant que couche limite turbulente, sauf en l'absence d'écoulement moyen. On caractérise d'ailleurs généralement la CLS comme la couche s'étendant de l'interface air-mer jusqu'à l'altitude où les flux varient de plus de 10% de leur valeur initiale à la surface. En pratique dans les modèles la hauteur de la CLS correspond à l'altitude du premier niveau vertical. Notons que pour notre étude nous ne ferons pas une utilisation spécifique de cette hypothèse en dehors de son application usuelle pour la paramétrisation des flux air-mer. L'hypothèse de flux constant permet de décrire la CLS en utilisant uniquement le flux calculé à une altitude donnée. En effet, il suffira de calculer le flux à une hauteur dans la CLS pour pouvoir considérer que ce flux est le flux constant dans cette couche. Dans la suite il nous faut maintenant exprimer ce flux constant en fonction des grandeurs moyennes de l'écoulement. Dans la CLS la paramétrisation usuelle est une paramétrisation d'ordre 0 (ou théorie de similitude) qui se base sur une analyse dimensionnelle du problème.

2.2.4 Analyse dimensionnelle

Fondements théoriques

L'analyse dimensionnelle permettra de regrouper certaines inconnues du problème afin de former de nouveaux paramètres (des groupes sans dimensions). Ce type d'analyse est particulièrement approprié pour l'étude de la couche limite car le nombre de paramètres est comparable au nombre de grandeurs physiques. La base de l'analyse dimensionnelle s'appuie sur le théorème suivant (Buckingham, 1914) :

Théorème π de Vaschy-Buckingham *Si un problème $f(v_1, v_2, \dots, v_n) = 0$ dépend de n variables v_i et fait intervenir p grandeurs principales (m, s, kg, K, \dots) alors il existe $(n - p)$ variables adimensionnelles π_i telles que*

$$f(\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{n-p}) = 0 \quad \text{avec } \pi_i = v_1^{\alpha_1} v_2^{\alpha_2} \dots v_i^{\alpha_i} \quad (2.9)$$

A partir de ce théorème nous pouvons définir les différentes étapes de mise en oeuvre de la théorie de similitude :

1. Sélectionner les variables pertinentes v_i
2. Organiser ces variables en groupes sans dimensions π_i

2.2 Description de la couche limite de surface

3. Déterminer les valeurs des π_i à partir de données expérimentales
4. Trouver une courbe empirique ou des équations pour décrire les relations entre les différents groupes formés.

Application à la CLS

Les grandeurs fondamentales dans la CLS sont la longueur $[L]$, la masse $[M]$, le temps $[T]$, la température $[K]$. Toutes les grandeurs physiques présentes dans les équations descriptives de la CLS peuvent s'exprimer par une combinaison de puissances de ces unités. Les variables caractéristiques de la CLS sont

- ν, ν_θ, ν_q , les coefficients de diffusion moléculaire
- τ, Q_0 , les flux constants dans la CLS
- β , la flottabilité
- z , la coordonnée verticale

Pour la suite on choisit de relier directement le flux de quantité de mouvement (aussi appelé *tension de surface*) τ à une vitesse u_* (appelée *vitesse de frottement*) définie par la relation $\tau = \rho u_*^2$. Nous supposons que l'on se place suffisamment loin de la surface pour pouvoir ainsi éliminer les termes de diffusion moléculaire. Ces termes sont en pratique non négligeables seulement à proximité de la sous-couche visqueuse à l'interface air-mer. Cette hypothèse qui apparaît relativement anodine est d'une importance toute particulière. En effet cela revient à remarquer que le résultat de l'analyse dimensionnelle et le formalisme en découlant ne sera valable uniquement qu'à partir d'une certaine hauteur à laquelle l'influence de la diffusion moléculaire est réellement négligeable. Sous cette hypothèse les paramètres pertinents pour notre étude seront

variable	β	u_*	Q_0	z
dimension	$LT^{-2}K^{-1}$	LT^{-1}	$LT^{-1}K$	L

On suppose donc que les profils verticaux de $\langle u(z) \rangle$ et $\langle \theta(z) \rangle$ dans la CLS dépendent uniquement de u_* , Q_0 , z et de β . Ce choix correspond aux hypothèses de Monin & Obukhov (1954). On parle souvent de théorie de similitude car le comportement de la CLS adimensionnée par des paramètres d'échelles, à déterminer, est toujours "le même". Le terme de flottabilité β a une importance toute particulière car il introduit la notion de stratification, qui est directement liée à la notion de stabilité de la CLS introduite précédemment. En effet, dans le cas neutre, la production thermique d'énergie cinétique turbulente est nulle et la

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

turbulence est causée par la seule production mécanique. Pour le cas d'une couche stratifiée, l'atmosphère est traversée verticalement par un flux de chaleur. Donc, dans le cas général, le flux de chaleur turbulent et la gravité interviennent pour produire de la turbulence (cas instable) ou pour détruire la turbulence (cas stable).

Cas neutre

Dans le cas d'une CLS neutre la production thermique d'énergie est nulle, donc les paramètres importants seront u_* et z . Si on cherche à exprimer le gradient $\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z}$, le problème dépend de 3 variables et de 2 grandeurs physiques donc, d'après le théorème précédent, d'un unique paramètre. On trouve, de manière triviale, que ce paramètre correspond au groupe sans dimension suivant :

$$\pi_1 = \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \frac{z}{u_*} \quad (2.10)$$

Comme mentionné dans Tennekes (1973), l'expérience montre que ce groupe sans dimension peut être considéré comme constant, $\pi_1 = k^{-1}$ où k correspond à la constante de Von Karman. Nous avons alors dans le cas neutre

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = \frac{u_*}{kz} \quad (2.11)$$

Suivant les expériences la "constante" k est en fait légèrement variable, les valeurs typiques sont entre 0.35 et 0.4.

Cas non-neutre

Lorsque la CLS est dans un état stable ou instable, la production thermique n'est plus négligeable. Il va donc falloir compléter le groupe sans dimension trouvé dans le cas neutre par un nouveau groupe prenant en compte la flottabilité et le flux de chaleur. La problème contient alors 5 variables et 3 grandeurs physiques, il requiert donc deux groupes sans dimension. L'objectif est de trouver une nouvelle échelle de longueur dépendant de u_* , Q_0 et β . Pour cela on recherche les exposants (notés de a à g) pour avoir des égalités consistantes au niveau dimensionnel

$$z = \beta^a Q_0^b u_*^c \quad \Rightarrow \quad a = b = -1, c = 3 \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = \beta^e Q_0^f u_*^g \quad \Rightarrow \quad e = f = -1, g = 2 \quad (2.13)$$

$$(2.14)$$

2.2 Description de la couche limite de surface

Nous obtenons alors une nouvelle échelle de longueur $L_{\text{mo}} = \frac{u_*^3}{k\beta Q_0}$ appelée longueur de *Monin-Obukhov*, et ainsi les groupes sans dimensions sont

$$\pi_2 = \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \frac{L_{\text{mo}}}{u_*} \quad \pi_3 = \frac{z}{L_{\text{mo}}} \quad (2.15)$$

On peut aisément retrouver le groupe sans dimension défini dans le cas neutre : en effet $\pi_2 \pi_3 = \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \frac{z}{u_*} = \pi_1$. La longueur de Monin-Obukhov est en pratique utilisée pour définir un paramètre $\zeta = \pi_3$ de stabilité de la CLS. En définissant $\zeta = \frac{z}{L_{\text{mo}}} = \frac{zk\beta Q_0}{u_*^3}$, on remarque que $\zeta = 0$ dans le cas neutre (absence de production thermique), ζ sera négatif dans le cas instable et ζ sera positif dans le cas stable. Pour compléter l'étude il convient de trouver une relation fonctionnelle ϕ_m entre les deux différents groupes sans dimensions obtenus

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} \frac{kz}{u_*} = \phi_m(\zeta) \quad (2.16)$$

On multiplie ici par la constante de Von Karman pour que le cas neutre se simplifie en $\phi_m = 1$. Si maintenant nous nous intéressons à l'évolution de la température potentielle $\langle \theta \rangle$ dans la CLS, nous procédons de manière similaire

$$\frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} = \beta^a Q_0^b u_*^c \quad \Rightarrow \quad a = 1, b = 2, c = -4 \quad (2.17)$$

qui fournit un nouveau groupe sans dimension $\pi'_1 = \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} \frac{\beta Q_0^2}{u_*^4}$ et on peut définir

$\pi'_3 = \pi'_1 \pi_3 = \frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} \frac{u_* z}{Q_0}$. Cette dernière relation suggère une échelle de température θ_* donnée par $\theta_* = \frac{Q_0}{u_*}$ et

$$\frac{\partial \langle \theta \rangle}{\partial z} \frac{kz}{\theta_*} = \phi_s(\zeta) \quad (2.18)$$

Un certain nombre d'études ont été menées pour déterminer la forme de ϕ_m et ϕ_s , citons par exemple Businger *et al.* (1971) ou Högström (1988) pour une revue. Ces études se basent sur une approche empirique, il n'y a donc pas de réel consensus autour de leur forme. Donnons, à titre d'exemple, les fonctions proposées dans Högström (1988)

$$\phi_m = \phi_s = 1 + 5\zeta \quad \text{pour } \zeta > 0 \quad (2.19)$$

$$\phi_s = \phi_m^2 = (1 - 16\zeta)^{-1/2} \quad \text{pour } -1 < \zeta < 0 \quad (2.20)$$

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

Cas asymptotique : la convection libre

Lorsque que le vent est très faible, u_* devient négligeable (θ_* tend conjointement vers l'infini) et cesse d'être un paramètre d'échelle pertinent. On nomme cette situation la *convection libre*, en pratique il y a absence de vent et la température de surface de l'océan est élevée, un mouvement convectif se déclenche donc pour redistribuer de l'énergie sur la colonne d'air. Ce cas est d'une importance toute particulière dans le cadre du couplage océan-atmosphère car il est typique des zones appelées *warm pool* (comme par exemple la zone du Pacifique équatorial liée aux phénomènes *El Nino/La Nina*). La théorie de Monin-Obukhov n'est en général plus applicable dans ce cas. Il faut alors définir un nouvel ensemble pertinent dans cette situation. Le nouvel ensemble de variables pertinentes est basé sur β, Q_0 et z . En appliquant la même méthodologie que précédemment, nous obtenons deux nouvelles échelles de vitesse et de température :

$$u_f = (z\beta Q_0)^{\frac{1}{3}} \quad \theta_f = \left(\frac{Q_0^2}{\beta z}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.21)$$

L'échelle u_f est parfois notée w_* car la convection correspond au développement d'un mouvement vertical.

Une méthodologie pour inclure ce cas asymptotique de convection libre dans la formulation de Monin-Obukhov a été proposée par Beljaars (1994). L'idée est de définir la vitesse moyenne $\langle U \rangle$ par la relation suivante

$$\langle U \rangle^2 = \langle u \rangle^2 + \langle v \rangle^2 + (cw_*)^2 \quad (2.22)$$

avec c une constante définie empiriquement. En définissant la vitesse de cette façon dans le cas d'une convection libre ($\langle u \rangle = \langle v \rangle = 0$) $\langle U \rangle$ n'est plus identiquement nulle, u_* n'est donc plus négligeable et ainsi les groupes sans dimensions trouvés précédemment demeurent pertinents.

2.2.5 Formulation *bulk*

Afin d'obtenir l'évolution des quantités moyennes dans la CLS il suffit d'intégrer les gradients obtenus précédemment (2.16-2.18). Comme décrit dans Paulson (1970), nous obtenons

$$\frac{\langle u(z) \rangle - \langle u(z_0) \rangle}{u_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) \right] \quad \frac{\langle \theta(z) \rangle - \langle \theta(z_\theta) \rangle}{\theta_*} = \frac{1}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_\theta} \right) - \psi_s(\zeta) \right] \quad (2.23)$$

2.2 Description de la couche limite de surface

où les termes z_0 et z_θ , qui apparaissent comme des constantes d'intégration, sont suffisants pour caractériser les propriétés dynamiques de l'interface air-mer. Ces termes correspondent à des *longueurs de rugosité*. Les variables $\langle u(z_0) \rangle$ et $\langle \theta(z_\theta) \rangle$ sont communément notées SSU et SST (SS pour *sea surface*). Pour alléger les notations nous introduisons $\Delta U = \langle u(z) \rangle - SSU$ et $\Delta \theta = \langle \theta(z) \rangle - SST$. La formulation des fonctions ψ_m et ψ_s peut être trouvée dans Large (2005). Les relations (2.23) permettent de définir les flux dans la couche de surface comme la différence entre les quantités moyennes près de la surface et les quantités à une altitude donnée de la CLS. En effet, en partant des relations (2.8) et en remarquant que $\tau = \rho u_*^2$ (cf §2.2.4) et que $Q_0 = u_* \theta_*$ nous obtenons

$$\frac{|\bar{\tau}|}{\rho} = -\langle u'w' \rangle_0 = \frac{k^2 |\Delta U| \Delta U}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) \right]^2} \quad (2.24)$$

$$\frac{Q_H}{\rho c_p} = -\langle \theta'w' \rangle_0 = \frac{k^2 |\Delta U| \Delta \theta}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) \right] \left[\ln \left(\frac{z}{z_\theta} \right) - \psi_s(\zeta) \right]} \quad (2.25)$$

En notant $\langle u'w' \rangle_0$ et $\langle \theta'w' \rangle_0$ les flux constants dans la CLS. Ces relations permettent de définir des coefficients d'échange C_D (*drag coefficient*) et C_H (*Stanton number*)

$$C_D = \frac{k^2}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) \right]^2} \quad C_H = \frac{k\sqrt{C_D}}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_\theta} \right) - \psi_s(\zeta) \right]} \quad (2.26)$$

qui sont nommés *Bulk transfer coefficients*.

2.2.6 Prise en compte de l'humidité

Nous avons présenté pour le moment le cheminement et les hypothèses successives permettant le calcul des flux turbulents dans la CLS. Nous proposons maintenant d'inclure l'effet de l'humidité qui a, pour le moment, été négligée. L'humidité intervient directement sur le terme de flottabilité β et son effet est inclus par l'intermédiaire du concept de température potentielle virtuelle, θ_v , qui correspond à la température potentielle de l'air sec à la densité de l'air humide. De plus, on définit q comme l'humidité spécifique de l'air correspondant à la masse de vapeur d'eau par unité de masse d'air humide. Sans entrer dans les détails du calcul, la température potentielle virtuelle vaut $\theta_v = \theta(1 + 0.6078q)$. On complète notre problème par une équation de conservation pour l'humidité spécifique q et on note E le flux

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

d'évaporation constant dans la CLS. L'échelle pertinente pour q est alors telle que $u_* q_* = E$ et

$$\frac{E}{\rho} = -\langle q'w' \rangle_0 = \frac{k^2 |\Delta U| (\langle q(z) \rangle - \langle q(z_q) \rangle)}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m(\zeta) \right] \left[\ln \left(\frac{z}{z_q} \right) - \psi_s(\zeta) \right]} \quad (2.27)$$

La longueur de Monin Obukhov est de même modifiée car à $\beta = \frac{g}{\langle \theta \rangle}$ il faut substituer $\beta_v = \frac{g}{\langle \theta_v \rangle}$ ce qui nous donne $L_{mo} = \frac{u_*^3}{k (g / \langle \theta_v \rangle) Q_{0,v}} = \frac{u_*^3}{k g u_* \left(\frac{\theta_*}{\langle \theta_v \rangle} + 0.6078 \frac{q_*}{(1+0.6078 \langle q \rangle)} \right)}$. Nous pouvons, de plus, naturellement définir un coefficient d'échange C_E

$$C_E = \frac{k \sqrt{C_D}}{\left[\ln \left(\frac{z}{z_q} \right) - \psi_s(\zeta) \right]} \quad (2.28)$$

La valeur $q(z_q)$ qui correspond à l'humidité à la surface de l'océan est en pratique calculée à partir de la *SST* en supposant que l'air est saturé à l'interface air-mer,

$$q(z_q) = q_{sat}(SST) = \frac{0.98}{\rho} 640380 e^{-\frac{5107.4}{SST}} \quad (\text{Large, 2005}).$$

2.2.7 Calcul pratique des flux turbulents

Si l'on se place du point de vue discret, les relations (2.24) et (2.25) montrent que les flux dans la couche limite sont calculés par l'intermédiaire de la différence entre les variables atmosphériques prises au niveau vertical le plus proche de la surface et les variables océaniques calculées près de l'interface air-mer. Cette différence est ensuite multipliée par un coefficient d'échange. Il est important de noter que les niveaux verticaux près de la surface doivent être choisis assez loin de celle-ci pour que l'hypothèse qui consiste à négliger l'influence moléculaire soit toujours justifiée. On utilise donc la dénomination de variable *Bulk* qui correspond à la valeur d'une variable "loin" de la surface. Cette remarque montre clairement qu'il n'y a pas d'interfaces communes aux domaines de calcul des deux modèles considérés. Ceux-ci "communiqueront" uniquement par l'intermédiaire d'une paramétrisation de couche limite, ce qui complexifie le problème. En pratique on suppose que la CLS s'étend de l'interface air-mer jusqu'à l'altitude du premier niveau vertical du modèle d'atmosphère (typiquement entre 10 et 60 m).

Les relations présentées jusqu'ici nous permettent de calculer les flux turbulents de la forme $\langle w'X' \rangle_0$ dans la CLS. Cependant le calcul de ces flux n'est pas direct. Prenons l'exemple de la quantité de mouvement τ : celle-ci est liée à l'échelle de vitesse u_* qui est elle-même

2.2 Description de la couche limite de surface

impliquée dans le calcul du paramètre de stabilité ζ . Dans la relation (2.24) le terme u_* est donc présent dans le membre de gauche ainsi que dans le membre de droite dans une fonction non linéaire. Le calcul de τ nécessite donc un processus itératif de type recherche de point fixe. Comme nous le verrons par la suite, les algorithmes de calcul sont basés seulement depuis peu sur ce processus itératif. Jusqu'à présent des méthodes de résolution directes (non itératives) comme la paramétrisation de Louis ont été souvent privilégiées pour limiter les coûts de calcul (Louis, 1979). Cependant ces méthodes directes résultent d'une simplification des relations précédentes, ils sont donc basé sur une formulation approchée du problème. De plus, elles nécessitent la détermination de fonctions empiriques supplémentaires ainsi que la spécification des longueurs z_0 et z_θ .

Nous avons présenté aussi clairement que possible dans cette section la méthodologie usuelle pour calculer les composantes turbulentes $\langle w'X' \rangle_0$ des flux air-mer.

2.3 Calcul des flux air-mer

La compréhension et la représentation des phénomènes physiques se développant à l'interface air-mer ont un rôle clef lorsque l'on souhaite modéliser le système climatique. Dans un premier temps cette connaissance a été basée sur la théorie de Monin-Obukhov mais elle a été par la suite enrichie par des techniques de mesure (directes ou indirectes) des flux. Un calcul précis des flux est un passage obligé vers le développement de modèles couplés performants. Il est de plus important de bien se rendre compte du degré d'approximation (et donc d'incertitude) attaché aux méthodes actuelles de quantification des échanges entre l'océan et l'atmosphère. Nous pouvons citer un certain nombre de références complètes abordant ce sujet en détails, par exemple Smith *et al.* (1996), Edson *et al.* (1999) ou Large (2005).

2.3.1 Les processus physiques à l'interface air-mer

La seule force externe au système air-mer est le flux solaire, qui gouverne l'évolution du climat de la Terre. A l'intérieur de ce système l'évolution est ensuite directement liée au transport, à la transformation et à la restitution d'énergie entre les deux composantes principales que sont l'océan et l'atmosphère. L'interface océan-atmosphère est dynamique : de la matière et de l'énergie sont continuellement échangés. Ces échanges sont guidés par des processus turbulents et radiatifs et correspondent à trois flux principaux : un flux de quantité de mouvement $\vec{\tau}$, un flux de chaleur Q et un flux d'eau douce F . Le flux de quantité de mouvement ou tension de vent (*wind stress*) agit comme une force mettant en mouvement l'océan. Parallèlement cette force agit comme un "frein" pour les vents. Les échanges de chaleur conjointement aux précipitations et à l'évaporation induisent des variations de densité qui alimentent ensuite la dynamique de l'océan et de l'atmosphère.

Flux radiatifs

Le rayonnement solaire entrant par le haut de l'atmosphère est lié à l'élévation du soleil et à l'inclinaison de l'axe de la Terre par rapport à celui-ci. Dans l'atmosphère les nuages (et autres constituants) absorbent ou réfléchissent partiellement ce rayonnement entrant. C'est donc la couverture nuageuse qui déterminera, en grande partie, la quantité d'énergie solaire qui arrive à la surface de l'océan. Ensuite cette partie du flux solaire arrivant à la surface

2.3 Calcul des flux air-mer

n'est pas totalement absorbée, une partie est réfléchi. On appelle *albédo* (notée α) la proportion de rayonnement solaire qui est réfléchi dans l'atmosphère. Les propriétés optiques de l'eau de mer font que le flux solaire (que l'on notera Q_S) est absorbé dans les premiers mètres de l'océan, donnant ainsi lieu à une couche chaude (on parle de *warm-layer effect*) qui est parfois paramétrisée.

Le rayonnement solaire se caractérise par des longueurs d'onde courtes (0.4 à 0.7 μm). Un rayonnement additionnel de type *corps noir*, caractérisé par des longueurs d'onde de l'ordre de 50 μm , se produit à l'interface air-mer. En effet, tout corps émet de l'énergie rayonnante dont le spectre dépend de sa température et de sa nature. En assimilant l'océan à un corps noir (i.e. dont le rayonnement ne dépend que de sa température) l'énergie radiative $Q_{L\uparrow}$ émise est directement donnée par la loi de Stephan-Boltzmann, $Q_{L\uparrow} = -\epsilon\sigma (SST)^4$, où SST est la température de surface de l'océan, ϵ son émissivité et $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$ (constante de Stephan). Ce rayonnement a une longueur d'onde plus longue que le rayonnement solaire, on parle de *longwave radiation* ou de rayonnement infrarouge. Le rayonnement infrarouge correspond à une perte de chaleur dans une couche superficielle (de quelques millimètres) à la surface de l'océan et est en partie responsable d'une température de peau plus froide de quelques dixièmes de degrés (on parle de *cool-skin effect*). La température de surface de l'océan prenant en compte cette température de peau plus froide sera appelée température *skin* et la température juste en dessous de cette couche froide est appelée température *bulk*. En toute rigueur dans la formule donnant $Q_{L\uparrow}$ la température de surface de l'océan doit être la température *skin*. A contrario la température de surface impliquée dans les formules *bulk* doit être la température *bulk* car ces formules ont été calibrées avec cette température. Plus généralement la température *bulk* correspond à la température du fluide "loin" de la surface et est relativement aisée à mesurer au contraire de la température de peau *skin* qui nécessite un appareillage très précis.

Flux turbulents

Nous avons présenté dans la section 2.2 un certain nombre de flux turbulents. Ces flux notés $\vec{\tau}$, Q_H et E correspondent à des flux de quantité de mouvement, de chaleur sensible et d'évaporation. A partir de l'évaporation nous pouvons définir un flux de chaleur latente Q_E par $Q_E = \Lambda E$ avec $\Lambda = 2.5 \times 10^6 J.kg^{-1}$ la chaleur latente de vaporisation.

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

Flux air-mer

A partir des remarques précédentes nous pouvons définir un flux net de chaleur Q_{net} qui correspond à la différence entre les pertes et les gains de chaleur à l'interface air-mer

$$Q_{net} = (1 - \alpha)Q_S + Q_{L\downarrow} + Q_{L\uparrow} + Q_E + Q_H \quad (2.29)$$

ainsi qu'un flux d'eau douce qui est typiquement (si l'on néglige l'apport d'eau douce par les fleuves) la différence entre l'évaporation et les précipitations

$$F = E - P \quad (2.30)$$

Les composantes radiatives Q_S et $Q_{L\downarrow}$, ainsi que les précipitations P sont directement fournies par le modèle d'atmosphère. Les flux Q_{net} , F et $\vec{\tau}$ sont continus à travers l'interface air-mer. De manière générale, comme l'illustre la figure 2.3, nous voyons qu'un grand nombre de variables est nécessaire au calcul des flux air-mer. L'incertitude (et d'éventuels biais) sur le calcul de chaque variable prise indépendamment resurgit donc sur le flux. Il est de plus important de remarquer, comme précisé dans Large (2005), que même avec des valeurs "parfaites" de l'écoulement moyen les flux calculés ne demeureront qu'une approximation des "vrais" flux. Les sources d'erreurs systématiques dans le calcul des flux air-mer peuvent être divisées en deux parties : d'une part celles liées aux hypothèses lors de la conception des paramétrisations de couche limite, et d'autre part celles liées au calcul des valeurs moyennes effectué par les modèles numériques utilisés. Un des problèmes majeurs est notamment l'incertitude, parfois très importante, sur le calcul de la couverture nuageuse dans les modèles qui a une influence directe sur le calcul du flux solaire parvenant à l'interface air-mer.

2.3.2 Les algorithmes de calcul

Nous avons présenté jusqu'à maintenant les différentes formules pour paramétriser les flux turbulents impliqués dans le calcul des flux air-mer. Ces flux sont calculés par l'intermédiaire de (2.24), (2.25) et (2.27). Dans ces formules les coefficients d'échange C_D , C_H et C_E dépendent directement de l'altitude z , de la stabilité ζ et des longueurs de rugosité z_0 , z_θ et z_q . Cependant il est en pratique impossible d'avoir des mesures suffisantes en précision et en quantité des coefficients d'échange en fonction de z, ζ, z_0, z_θ et z_q .

La méthodologie usuelle est alors de définir un état neutre (avec un "N" en indice) à 10

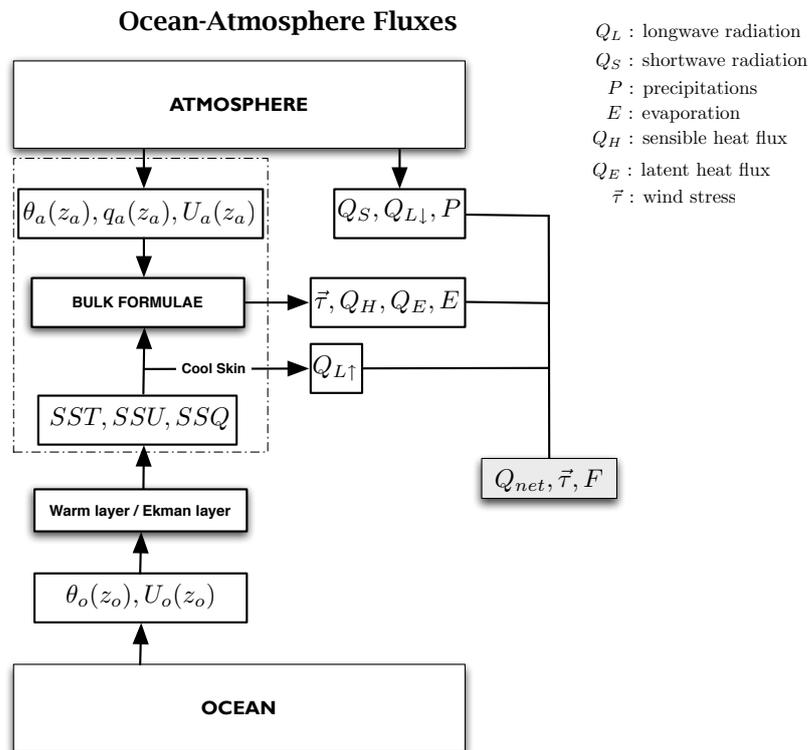


Fig. 2.3: Représentation schématique des différentes variables et corrections impliquées dans le calcul des flux air-mer. On note z_o (resp. z_a) la profondeur (resp. l'altitude) du premier niveau vertical du modèle numérique considéré.

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

mètres d'altitude (afin d'éliminer la dépendance en ζ et z). Les coefficients d'échange sont alors

$$C_{DN} = \frac{k^2}{\left[\ln\left(\frac{10m}{z_0}\right)\right]^2} \quad C_{HN} = \frac{k\sqrt{C_{DN}}}{\left[\ln\left(\frac{10m}{z_\theta}\right)\right]} \quad C_{EN} = \frac{k\sqrt{C_{DN}}}{\left[\ln\left(\frac{10m}{z_q}\right)\right]} \quad (2.31)$$

Ces coefficients sous conditions neutres peuvent alors être estimés soit directement à partir de mesures (Large & Pond, 1981, 1982) ou (Smith, 1980), soit en passant par une paramétrisation des longueurs de rugosité (Charnock, 1955). Notons que dans les deux cas les valeurs de C_{DN} , C_{HN} et C_{EN} sont déterminées à partir de mesures moyennées en temps et ne sont pas supposées correspondre à des valeurs instantanées. Récemment des campagnes de mesures "massives" comme TOGA-COARE ¹ ou CORE ² ont permis de raffiner les algorithmes (Fairall *et al.*, 2003); (Large & Yeager, 2004). Des corrections ont de plus été apportées pour prendre en compte les effets de couche chaude et de température de peau plus froide (Fairall *et al.*, 1996).

La spécification d'un état de référence neutre à 10 mètres déterminé grâce à des mesures permet en pratique d'initialiser un algorithme itératif de calcul des flux. L'intérêt est également de supprimer du problème la spécification des longueurs de rugosité en remarquant que

$$C_{DN} = C_D \left(1 + \frac{\sqrt{C_D}}{k} \left[\ln\left(\frac{10m}{z}\right) + \psi_m(\zeta) \right] \right)^{-2} \quad (2.32)$$

Il est également possible de lier C_H et C_{HN} ainsi que C_E et C_{EN} . La valeur de z dans (2.32) correspond à l'altitude du premier niveau vertical du modèle d'atmosphère. La dernière inconnue est alors ζ . L'estimation des flux se ramène alors à un calcul itératif sur le paramètre de stabilité ζ . Une description détaillée de ce type d'algorithme itératif de calcul des flux air-mer est présentée dans Large (2005).

L'objectif n'est pas ici de juger de la pertinence ou non d'un algorithme donné de calcul des flux air-mer mais plutôt de prendre conscience du degré d'approximation des diverses méthodes. Nous proposons de conclure notre introduction au calcul des flux air-mer par deux remarques qui nous paraissent importantes.

¹Tropical Ocean Global Atmosphere Coupled Ocean Atmosphere Response Experiment : <http://www.ncdc.noaa.gov/oa/coare/>

²Common Ocean-ice Reference Experiments

Note sur le caractère contractant des fonctions de paramétrisation

Il n'y a pas eu, à notre connaissance, de vérification systématique du caractère contractant des diverses fonctions impliquées dans la recherche de points fixes des algorithmes présentés précédemment. Cependant, Pagowski (2006) a récemment montré que la résolution du problème avec un processus itératif de type Newton-Raphson est inconditionnellement convergent en 5 itérations au plus. Pour illustrer cela, imaginons que nous souhaitions calculer la tension de vent sous condition neutre en utilisant la relation de Charnock pour paramétriser la longueur de rugosité. La relation de Charnock est basée sur le groupe sans dimension $\frac{z_0 g}{u_*^2}$ qui a été empiriquement approché par une constante $\alpha_c = 0.0185$. En remarquant que $\vec{\tau} = \rho u_*^2$ on trouve en combinant la relation de Charnock avec l'égalité $u_*^2 = C_{DN} (\Delta U)^2$ que u_* est solution du problème de point fixe

$$u_* = g(u_*) = k|\Delta U| \left(\ln \left(\frac{\alpha_c u_*^2}{gz} \right) \right)^{-1} \quad (2.33)$$

Pour une valeur initiale donnée de l'algorithme, le point fixe est unique si cette valeur appartient à un intervalle où la fonction g est contractante (i.e. $|\partial g / \partial u_*| < 1$). Cette fonction est représentée sur la figure 2.4 pour des valeurs typiques des paramètres. On voit, par exemple, que pour $\Delta U = 20 m.s^{-1}$ l'algorithme doit être initialisé avec une valeur $u_* > 0.1 m.s^{-1}$. Notons que dans ce cas la valeur de u_* est de l'ordre de $u_* = \sqrt{C_{DN} (\Delta U)^2} \approx \sqrt{10^{-3} \times 20^2} \approx 0.7 m.s^{-1}$.

Note sur l'effet des vagues

Nous n'avons pas, jusqu'à maintenant, évoqué la problématique liée à la présence des vagues à l'interface air-mer. Concrètement les phénomènes affectés par la présence des vagues sont :

- le transport de masse : dérive de Stokes
- les flux océan-atmosphère, variations de la tension de vent selon le stade de développement des vagues
- l'intensification du mélange sous des vagues déferlantes
- les flux de quantité de mouvement associés aux vagues
- les modifications du frottement sur le fond

Comme nous l'avons vu précédemment la théorie de Monin-Obukhov suppose que la turbulence est uniquement influencée par des forçages thermiques et mécaniques. Il est donc en

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

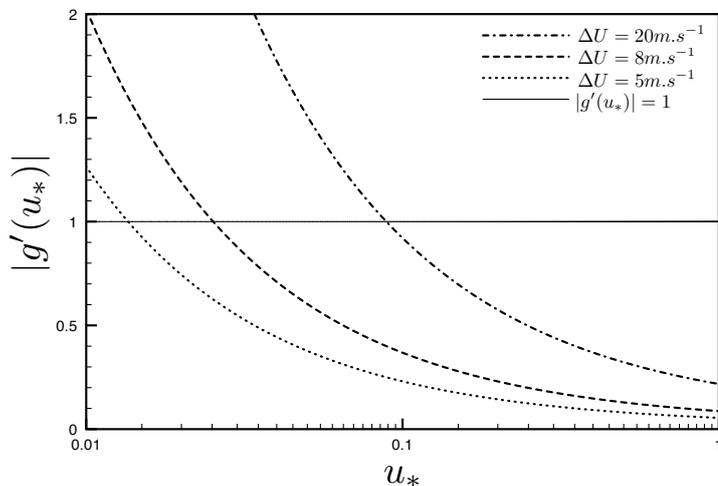


Fig. 2.4: Evolution de $|\partial g/\partial u_*|$ en fonction de u_* pour différentes valeurs de ΔU .

théorie nécessaire d'ajouter des groupes non-dimensionnels supplémentaires pour prendre en compte des termes supplémentaires induits par les vagues. De manière pratique l'effet des vagues est exclu du problème car on suppose que la théorie de Monin-Obukhov n'est valable qu'à partir d'une certaine distance de l'interface air-mer, cette distance correspondant à la distance où l'influence des vagues devient négligeable (voir figure 2.5). Le fait d'exclure l'effet des vagues dans le calcul des flux air-mer est bien sûr une approximation qui peut dans certains cas être forte.

Nous proposons d'aborder dans la suite la paramétrisation des CLO et CLA dans leur entier. En effet, pour le moment notre description s'est limitée à la CLS près de l'interface air-mer. Cette description nous a permis d'introduire la théorie permettant de calculer les flux turbulents $\langle w'X' \rangle_0$ en surface. Il nous faut maintenant introduire la manière dont le flux $\langle w'X' \rangle(z)$ est paramétrisé dans la couche limite lorsque l'on s'éloigne de l'interface air-mer.

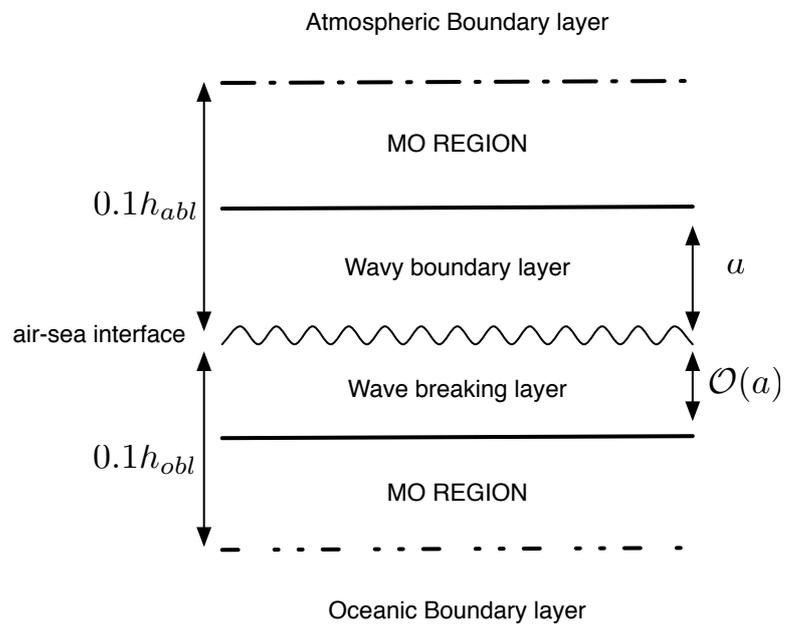


Fig. 2.5: Représentation schématique des différentes couches constituant les couches limites océanique (de profondeur h_{obl}) et atmosphérique (d'altitude h_{abl}). Les deux CLS de l'océan et de l'atmosphère ("MO region") sont séparées par une couche limite due aux vagues de hauteur moyenne a .

2.4 Paramétrisation des couches limites turbulentes

Si l'on se réfère à la figure 2.2, nous avons pour le moment introduit uniquement la description de la CLS sans aborder ce que nous avons nommé la couche d'Ekman. A l'intérieur même des modèles, les termes $\langle X'w' \rangle (z)$ doivent également être paramétrisés à l'aide d'une fermeture turbulente. Ces termes sont importants dans notre étude car ils sont sensibles aux forçages de surface. Nous nous intéressons ici à des fermetures d'ordre 1 comme décrite dans le §1.2.3. Ce type de fermeture consiste à estimer les termes turbulents à l'aide des valeurs moyennes de l'écoulement : $\langle X'w' \rangle (z) = -K_z(z) \frac{\partial \langle X \rangle}{\partial z}$. Le problème est alors de spécifier la valeur de K_z , la diffusion turbulente sur la verticale. Les règles usuelles pour paramétriser K_z sont les suivantes (Stull, 1988)

- $K_z = 0$ en absence de turbulence.
- $K_z = 0$ à l'interface (pas de transport de turbulence à travers l'interface).
- K_z augmente lorsque l'énergie cinétique augmente.
- K_z varie en fonction de l'état de stabilité de la couche limite.
- K_z est défini positif.

Nous basons notre description sur les modèles proposés dans Troen & Mahrt (1986) pour la CLA et Large *et al.* (1994) pour la CLO en notant que les modèles de CLA servent le plus souvent de base aux modèles de la CLO. On part de l'hypothèse qu'en dehors de la CLS l'équation de diffusion est supposée suffisante pour décrire les effets du mélange turbulent dans la couche limite. C'est sur ce type d'équation que les schémas de paramétrisation sont habituellement validés. On s'intéresse donc à des équations de la forme

$$\frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial \langle w'X' \rangle}{\partial z} = 0 \quad (2.34)$$

pour une quantité X de l'écoulement moyen (on suppose implicitement $X = \langle X \rangle$ dans la suite). L'équation précédente devient, pour une fermeture d'ordre 1,

$$\frac{\partial X}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial X}{\partial z} \right) = 0 \quad (2.35)$$

la difficulté étant alors d'exprimer $K_z(z)$. Par soucis de clarté, nous notons de manière générique la diffusion turbulente K_z mais il convient de préciser que la valeur de K_z est différente suivant que l'on s'intéresse à des scalaires ou à la quantité de mouvement, elle varie donc en fonction de la grandeur X considérée. Nous proposons de nous intéresser ici

2.4 Paramétrisation des couches limites turbulentes

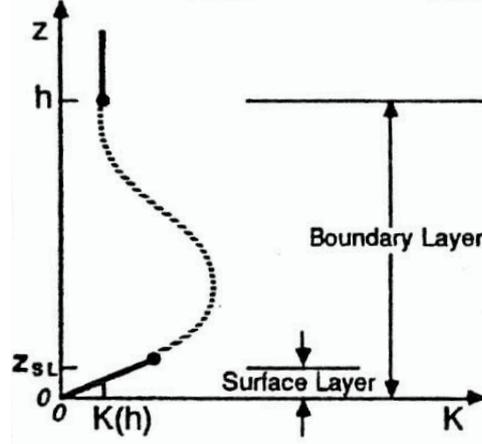


Fig. 2.6: Variation verticale typique du coefficient de diffusion turbulente K_z dans la CLA (O'Brien, 1970).

à la paramétrisation de la CLO. Dans le cadre de la paramétrisation qui nous intéresse, la fonction K_z est directement proportionnelle à la profondeur de couche limite h_{cl} et est supposée avoir la forme d'un polynôme d'ordre 3 (comme proposé dans O'Brien, 1970, figure 2.6) noté G , normalisé par une échelle de vitesse turbulente w_x :

$$K_z(z) = h_{cl} w_x \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) G \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) \quad (2.36)$$

En utilisant (2.16), ou de manière équivalente (2.18), on obtient

$$\langle w'X' \rangle_0 = - \left[\frac{u_* k z}{\phi_x(\zeta)} \right] \frac{\partial X}{\partial z} \quad (2.37)$$

qui combiné à la fermeture $\langle w'X' \rangle(z) = -K_z(z) \frac{\partial X}{\partial z}$ donne

$$w_x \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) G \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) = \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) \left[\frac{u_* k}{\phi_x(\zeta)} \right] \frac{\langle w'X' \rangle(z)}{\langle w'X' \rangle_0} \quad (2.38)$$

l'objectif étant de déterminer les coefficients du polynôme $G = a_0 + a_1 (z/h_{cl}) + a_2 (z/h_{cl})^2 + a_3 (z/h_{cl})^3$. La contrainte $K_z(0) = 0$ mentionnée précédemment impose $a_0 = 0$. Pour déter-

2. COUCHES LIMITES ET FLUX AIR-MER

miner a_1 et a_2 , on fait l'hypothèse d'une décroissance linéaire du flux dans la CLS, à savoir

$$\left. \frac{\langle w'X' \rangle(z)}{\langle w'X' \rangle_0} \right|_{CLS} = a_1 + a_2 \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) \quad (2.39)$$

Sans entrer dans les détails, il a été empiriquement trouvé $a_1 = 1$ (cf Lumley et Panofsky, 1964). Enfin a_2 et a_3 sont choisis afin d'assurer $K_z(h_{cl}) = 0$ et $dK_z/dz(h_{cl}) = 0$. L'équation (2.39) n'est pas totalement cohérente avec l'hypothèse de couche à flux constant introduite précédemment. Mais pour assurer une continuité de la fonction $K_z(z)$ entre la CLS et le reste de la couche limite on considère en pratique que le flux varie. Grâce à ces différentes contraintes, on trouve $G\left(\frac{z}{h_{cl}}\right) = \frac{z}{h_{cl}} \left(1 - \frac{z}{h_{cl}}\right)^2$. L'échelle de vitesse w_x est directement donnée par la relation (2.38)

$$w_x \left(\frac{z}{h_{cl}} \right) = \left[\frac{u_* k}{\phi_x(\zeta)} \right] \quad (2.40)$$

La fonction $\phi_x(\zeta)$ est déterminée en fonction de l'état de stabilité de la couche limite. Finalement pour avoir la description complète du profil de diffusion turbulente il reste à déterminer la profondeur h_{cl} de la couche limite. Celle-ci est communément calculée grâce au nombre (sans dimension) de Richardson *bulk* défini par $Ri_b(z) = \frac{(g/\theta)\Delta\theta(z)}{(\Delta U(z))^2}$. Ce nombre correspond à un rapport entre la production thermique et mécanique de turbulence. Il constitue ainsi une mesure de l'intensité de turbulence. Il est généralement admis que lorsque le nombre de Richardson devient plus petit qu'une valeur critique (déterminée en laboratoire) l'écoulement devient turbulent. La profondeur de la couche limite est alors caractérisée par la profondeur où $Ri_b(z)$ atteint une valeur critique Ri_c (typiquement $\approx 0.3 - 0.4$), voir Large *et al.* (1994) pour l'explication physique détaillée de cette contrainte. Des limitations supplémentaires sur la valeur de h_{cl} dans le cas stable sont apportées en partant de l'observation que dans ce cas h_{cl} doit être plus petit que la longueur de Monin-Obukhov et que la profondeur d'Ekman $h_E = \frac{0.7u_*}{f}$. Cependant cette méthodologie pour déterminer la profondeur de couche limite a été récemment modifiée (Shchepetkin & McWilliams, 2008). En effet, il s'est avéré que des discontinuités et des phénomènes d'hysteresis pouvaient se produire avec la méthode originale de calcul de h_{cl} notamment à cause des transitions entre les différents états de stabilité. L'objectif était donc de regrouper les différentes contraintes h_E , L_{mo} et Ri_b sous un seul et même critère. Ce nouveau critère définit la couche limite comme étant la couche intégrale dans laquelle la production nette de turbulence due aux effets déstabilisants (principalement le cisaillement) est équilibrée par les effets stabilisants (principalement la stratification et la

2.4 Paramétrisation des couches limites turbulentes

rotation). Dans cette nouvelle formulation h_{cl} est donc la première profondeur à laquelle $Cr(z) = 0$, avec

$$Cr(z) = \int_z^0 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z'} \right)^2 - \frac{N^2(z')}{\text{Ri}_c} - C_{ek} f^2 \right] dz' + \frac{V_t^2(z)}{|z|} \quad (2.41)$$

une fonction monotone, continue. La quantité $\frac{V_t^2(z)}{|z|}$ correspond à un cisaillement de vitesses turbulentes. On peut remarquer que cette nouvelle formulation prend en compte l'effet de la force de Coriolis (C_{ek} est une constante sans dimension). Au niveau de l'implémentation informatique de la paramétrisation, cela se traduit par la suppression des instructions conditionnelles (le code devient donc différentiable). La remarque précédente n'a pas un intérêt direct pour notre étude mais elle permet d'illustrer une démarche très intéressante qui consiste à s'intéresser à la consistance entre les schémas de fermeture et les aspects numériques des modèles.

Nous avons ici limité notre description de la paramétrisation aux points qui nous ont semblé importants pour la suite. En toute rigueur il faudrait mentionner l'ajout d'un terme γ_x non local dans (2.35) (non nul uniquement pour les scalaires) et l'ajout d'un terme $V_t(z)$, représentant une contribution turbulente au gradient de vitesse, au dénominateur de Ri_b . La paramétrisation présentée ici est communément appelée KPP (*K-profile-parameterization*) dans le contexte des modèles d'océan. Celle-ci est, entre autre, utilisée dans les modèles d'océan NEMO et ROMS. Une version équivalente, avec des bases théoriques identiques, est utilisée dans le modèle atmosphérique WRF, celle-ci correspond à une adaptation de Troen & Mahrt (1986) par Hong & Pan (1996). Les autres types de paramétrisations usuellement utilisées pour la couche limite sont souvent basées sur l'énergie cinétique turbulente (paramétrisations TKE, Bougeault & Lacarrere, 1989). Nous avons fait le choix d'étudier le cadre des paramétrisations de type *K-profile* car celles-ci sont utilisées dans les modèles numériques envisagés pour nos applications numériques.

Discussion

Nous proposons suite à cette première partie du manuscrit de faire un point sur ce qui a été présenté jusqu'à maintenant afin de clairement préciser les points importants pour la suite. Nous avons, entre autre, mis l'accent sur la nécessaire consistance entre les aspects physiques et numériques. Notre méthode devra ainsi prendre en compte la complexité physique à l'interface air-mer. Cette remarque a plusieurs implications :

- Premièrement la consistance que l'on souhaite imposer entre les deux modèles le sera via l'égalité des flux et les schémas de paramétrisation. En effet, les différents profils analytiques déterminés dans la CLS ne sont valables qu'à une certaine distance de la surface et la physique près de l'interface air-mer (au voisinage de la sous-couche visqueuse épaisse de quelques millimètres) est encore relativement peu connue. Forcer explicitement l'égalité des valeurs sur l'interface reviendrait à considérer que les profils verticaux dans la CLS sont valables jusqu'à l'interface air-mer. Or cela reviendrait à effectuer une extrapolation purement mathématique, sans signification physique.
- Une seconde contrainte vient du fait que la méthode *bulk* est par définition une estimation des flux basée sur des conditions moyennes qui ne sont pas supposées capturer les structures à petites échelles. La consistance que nous souhaitons imposer devra donc l'être sur des flux moyens et non sur des flux instantanés, on y reviendra plus en détails dans la partie 3.

Nous avons enfin constaté que le couplage océan-atmosphère peut être étudié en première approximation par l'intermédiaire d'un problème simplifié de couplage de deux équations de diffusion instationnaires, à coefficients variables et en une dimension. Comme nous l'avons vu, ce type d'équation contient une grande partie de la complexité physique du problème : elles sont forcées en surface par les flux air-mer et contiennent des termes turbulents $\langle X'w' \rangle(z)$ qui représentent l'impact sur la colonne d'air (resp. d'eau) des flux de surface. Elles semblent donc appropriées pour notre étude, avec X pouvant correspondre aux variables u, v, θ, S, q du problème.

A partir de ces remarques, nous pouvons formuler le problème de couplage à résoudre. On définit deux sous-domaines $\Omega_{\text{atm}} = [\varepsilon_a, L_a[$ et $\Omega_{\text{oce}} =] - L_o, -\varepsilon_o]$. On considérera que la couche limite de surface s'étend de $z = -\varepsilon_o$ à $z = \varepsilon_a$ correspondant à l'épaisseur de la sous-couche visqueuse que l'on considérera comme nulle. Si on introduit les coefficients de diffusion turbulente K_x^o et K_x^a , $x = m$ (*momentum*) pour les viscosités et $x = s$ (*scalar*) pour

les diffusivités, dans l'océan et dans l'atmosphère, la consistance requise au niveau du flux de quantité de mouvement $\vec{\tau}$ et de chaleur nette Q_{net} à l'interface air-mer peut s'écrire

$$\rho_{oce}K_m^o \frac{\partial \vec{U}_{oce}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \rho_{atm}K_m^a \frac{\partial \vec{U}_{atm}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \vec{\tau} \quad (2.42)$$

$$\rho_{oce}C_{p,o}K_s^o \frac{\partial \theta_{oce}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \rho_{atm}C_{p,a}K_s^a \frac{\partial \theta_{atm}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = Q_{net} \quad (2.43)$$

avec $\rho_{oce} = 1029kg.m^{-3}$ et $\rho_{atm} = 1.029kg.m^{-3}$ les masses volumiques de l'eau de mer et de l'air. $C_{p,o} = 4.18 \times 10^3 J.kg^{-1}C^{-1}$ et $C_{p,a} = 1.048 \times 10^3 J.kg^{-1}C^{-1}$ sont les capacités calorifiques. On peut également ajouter la condition de continuité du flux d'eau douce à la consistance requise.

On notera X_{atm} et X_{oce} une quantité scalaire ou vectorielle respectivement dans l'atmosphère et dans l'océan. Le problème de couplage s'écrira alors de façon générique :

Trouver X_{atm} et X_{oce} qui satisfont

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_{atm}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_x^a(z) \frac{\partial X_{atm}}{\partial z} \right) = f_{atm}, \quad \text{sur } \Omega_{atm} \times [0, T] \\ \frac{\partial X_{oce}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_x^o(z) \frac{\partial X_{oce}}{\partial z} \right) = f_{oce}, \quad \text{sur } \Omega_{oce} \times [0, T] \\ \rho_{oce}K_x^o \frac{\partial X_{oce}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \rho_{atm}K_x^a \frac{\partial X_{atm}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = F_{oa}(t) \quad \text{sur } \Gamma \times [0, T] \\ \mathcal{B}_{oce}X_{oce}(-L_o, t) = 0 \quad \mathcal{B}_{atm}X_{atm}(L_a, t) = 0 \quad t \in [0, T] \end{array} \right. \quad (2.44)$$

où f_{atm} et f_{oce} sont des termes sources. \mathcal{B}_{oce} et \mathcal{B}_{atm} sont deux opérateurs définissant les conditions limites au fond de l'océan et en haut de l'atmosphère. Pour écrire le problème sous cette forme générique on peut supposer que les capacités calorifiques sont incluses aux termes K_s^o et K_s^a . F_{oa} correspond aux flux océan-atmosphère précédemment introduits.

A première vue le système couplé (2.44) peut s'interpréter comme un couplage de type *Neumann-Neumann*. Cependant, en pratique (en omettant les flux radiatifs et l'humidité) celui-ci correspond aux conditions d'interface suivantes sur chaque sous-domaine :

$$K_x^o \frac{\partial X_{oce}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = C_{x,o}(X_{atm}(\varepsilon_a, t) - X_{oce}(-\varepsilon_o, t)) \quad K_x^a \frac{\partial X_{atm}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = C_{x,a}(X_{atm}(\varepsilon_a, t) - X_{oce}(-\varepsilon_o, t)) \quad (2.45)$$

Discussion

et donc à des conditions de type *Robin* (combinaison linéaire de conditions de *Dirichlet* et de *Neumann*). $C_{x,o}$ et $C_{x,a}$ peuvent alors être vues comme de simples constantes positives. L'existence et l'unicité des équations primitives de l'océan en deux dimensions (x - z) avec ce type de conditions de surface ont été montrées dans Bresch *et al.* (2003).

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction de ce manuscrit nous souhaitons mettre en place une méthode de Schwarz globale en temps pour aborder le problème de couplage (2.44). Celui-ci n'est cependant pas trivial à traiter, notamment en raison de la variabilité verticale du coefficient de diffusion et aussi en raison de la discontinuité de celui-ci à l'interface. Ces deux problèmes ont rarement été traités dans le cadre de l'algorithme de Schwarz. Nous proposons donc dans la partie 2 d'aborder ce problème dans un cadre "classique" où l'on cherchera à imposer l'égalité des flux mais aussi de la valeur sur l'interface pour ainsi nous appuyer sur les études existantes. On cherchera donc à compléter les connaissances actuelles sur les propriétés de convergence de l'algorithme de Schwarz. Dans la partie 3, nous reviendrons plus en détails sur l'algorithme complet de résolution de (2.44).

Deuxième partie

Algorithmes de Schwarz optimisés pour des problèmes d'évolution

Cette seconde partie, plus théorique, est axée autour de l'étude de convergence des algorithmes de Schwarz optimisés globaux en temps pour des problèmes de diffusion à coefficients variables et discontinus à l'interface. En effet, nous avons vu dans la partie 1 de ce manuscrit qu'une grande partie de la complexité physique du couplage océan-atmosphère peut être modélisée par ce type d'équation. Nous faisons au préalable une synthèse historique des principaux travaux de ce type. Ensuite nous proposons d'étudier dans un premier temps un modèle simplifié pour lequel les coefficients de diffusion (turbulente) sont supposés constants. Ce type de paramétrisation du mélange vertical par un coefficient constant, bien que simpliste, correspond au modèle proposé à l'origine par V. W. Ekman en 1905. Ce choix nous permet une détermination analytique de *conditions de transmission optimisées* de type Robin d'ordre 0 qui correspondent à l'approximation du paramètre de Robin par une valeur constante. Lorsque l'on considère le problème complet avec des coefficients variables, la question est donc de savoir si ce type de conditions de transmission fournit toujours des résultats satisfaisants. Pour cela nous introduirons une nouvelle approche permettant de déterminer, numériquement cette fois-ci, les *conditions de transmission optimisées* d'ordre 0 pour un algorithme à coefficients variables. Ces études n'étant pas propres au couplage océan-atmosphère, nous avons fait le choix de les mener avec des conditions d'interface classiques où le flux à l'interface est donné par une formule décentrée (et non une formule *bulk*) et où la consistance que l'on cherche à imposer est l'égalité des flux normaux et de la valeur sur l'interface. Nous pouvons ainsi nous référer aux études classiques menées dans le cadre de l'algorithme de Schwarz. Nous traitons le cas de deux sous-domaines sans-recouvrement. Nous traiterons dans la partie 3 plus spécifiquement du problème avec des conditions de transmission donnés par une paramétrisation de type *bulk*.

3

Algorithme de Schwarz optimisé pour un problème de diffusion à coefficients discontinus et constants

Sommaire

3.1	Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz	80
3.1.1	Algorithme de Schwarz pour des problèmes avec conditions aux bords	80
3.1.2	Algorithme de Schwarz pour des problèmes d'évolution	83
3.1.3	Optimisation des conditions de transmission	85
3.2	Introduction	90
3.3	Model problem and Optimized Schwarz Methods	91
3.3.1	Formulation of global-in-time Schwarz method	91
3.3.2	Convergence of the algorithm	93
3.3.3	Optimized Schwarz Method (OSM)	94
3.4	Optimized Schwarz method with <i>Neumann-Robin</i> interface conditions	95
3.5	OSM for a diffusion problem with discontinuous (but constant) coefficients : two-sided Robin transmission conditions	98
3.5.1	Behaviour of the convergence factor with respect to the Robin parameters	99
3.5.2	Extrema of ρ_{RR} with respect to ζ	100
3.5.3	Equioscillation of ρ_{RR} at the end points	100

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

3.5.4	Solution of the minmax problem	102
3.5.5	The continuous case	107
3.6	Conclusion	108
3.7	Etude de convergence avec des sous-domaines de dimension finie	110
3.7.1	Symboles optimaux en domaine borné	110
3.8	Optimisation par méthode de contrôle optimal	113

3.1 Avant-propos sur l’algorithme de Schwarz

Les méthodes de décomposition de domaine ont fait l’objet d’une attention toute particulière depuis la fin des années 80. En effet, ces méthodes permettent d’utiliser la puissance des calculateurs parallèles en décomposant un problème original en sous-problèmes quasi-indépendants les uns des autres. Comme nous le verrons le raccordement des sous-problèmes n’est cependant pas trivial. L’objectif ici n’est pas de présenter de manière exhaustive les diverses méthodes appartenant à la famille des méthodes de décomposition de domaine (méthode de Schwarz, méthode de Schur, méthode Mortar, méthode FETI¹, ...). Des descriptions détaillées de ces diverses méthodes peuvent être trouvées par exemple dans Quarteroni & Valli (1999) ou Toselli & Widlund (2004). Pour notre étude, nous envisageons d’utiliser l’algorithme de Schwarz ; nous limitons donc notre description à ce type de méthode.

3.1.1 Algorithme de Schwarz pour des problèmes avec conditions aux bords

Cette méthode a été historiquement introduite par Schwarz en 1869. Son problème était de prouver l’existence et l’unicité de la solution de l’équation de Poisson (en deux dimensions) sur un domaine constitué d’un carré et d’un disque (voir figure 3.1). Etant donné le fait que la solution du problème était connue sur le rectangle et sur le disque pris indépendamment, Schwarz a introduit un processus itératif permettant de ramener la résolution du problème global sur la géométrie complexe à la résolution du problème sur le disque et sur le rectangle uniquement.

¹Finite Element Tearing and Interconnecting

3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz

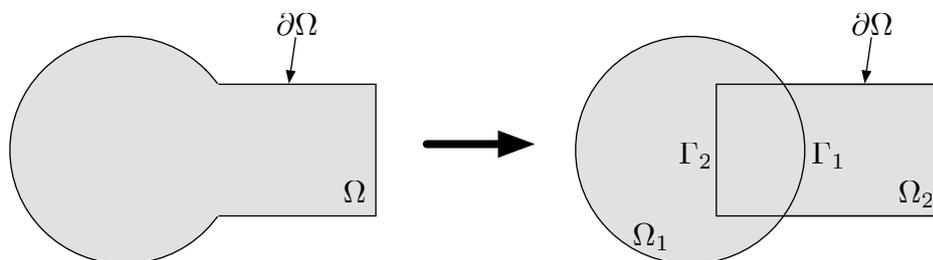


Fig. 3.1: Décomposition de domaine historiquement introduite par Schwarz.

En prenant les notations de la figure 3.1, le problème original

$$\begin{cases} \Delta u = f & \text{sur } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (3.1)$$

est séparé en deux sous-problèmes sur Ω_1 et Ω_2 . Ceux-ci sont résolus alternativement (avec u_2^0 donné sur Γ_1)

$$\begin{cases} \Delta u_1^k = f & \text{sur } \Omega_1 \\ u_1^k = 0 & \text{sur } \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega \\ u_1^k = u_2^{k-1} & \text{sur } \Gamma_1 \end{cases} \quad \begin{cases} \Delta u_2^k = f & \text{sur } \Omega_2 \\ u_2^k = 0 & \text{sur } \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega \\ u_2^k = u_1^k & \text{sur } \Gamma_2 \end{cases} \quad (3.2)$$

avec $k > 0$ le numéro de l'itération. Schwarz a montré la convergence de la solution de ce procédé itératif vers la solution du problème global (3.1) sur Ω . L'algorithme précédent est aussi appelé méthode de Schwarz *Gauss-Seidel* (par analogie aux méthodes itératives de résolution des systèmes linéaires), *Schwarz alternating method* ou encore algorithme de Schwarz *multiplicatif*.

Comme nous l'avons dit, la "philosophie" de l'algorithme de Schwarz convient particulièrement aux architectures parallèles. C'est pour cela que cette méthode a été étudiée en détail depuis l'avènement des calculateurs parallèles dans le milieu des années 80. Une extension de l'algorithme (3.2) a ainsi été proposée dans Lions (1988) afin de rendre l'algorithme original naturellement "parallèle". Le principe est simplement de modifier la condition $u_2^k = u_1^k$ sur Γ_2 en

$$u_2^k = u_1^{k-1} \quad \text{sur } \Gamma_2 \quad (3.3)$$

Le nouvel algorithme obtenu est communément appelé méthode de Schwarz *Jacobi* ou algorithme de Schwarz *parallèle*. La modification précédente facilite de plus l'extension de la méthode à un nombre arbitraire de sous-domaines.

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

Cependant, les algorithmes de Schwarz multiplicatifs et parallèles ne convergent que lorsque les sous-domaines se recouvrent. De plus, plus la taille du recouvrement est petite, plus la convergence est lente. Les constats précédents constituent une restriction sévère. Afin de remédier à ces problèmes une variante est proposée dans Lions (1990). L'algorithme classique s'appliquait à des domaines se recouvrant et échangeant des conditions de type *Dirichlet*. Lions l'a étendu à des cas sans recouvrement ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = \Gamma$) en remplaçant les conditions de *Dirichlet* par des conditions de *Robin* (combinaison linéaire de conditions de *Dirichlet* et de *Neumann*). L'algorithme original (3.2) modifié s'écrit alors

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta u_1^k = f & \text{sur } \Omega_1 \\ u_1^k = 0 & \text{sur } \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega \\ (\partial_{n_1} + p_1)u_1^k = (\partial_{n_1} + p_1)u_2^{k-1} & \text{sur } \Gamma \end{array} \right. \quad (3.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta u_2^k = f & \text{sur } \Omega_2 \\ u_2^k = 0 & \text{sur } \partial\Omega_2 \cap \partial\Omega \\ (\partial_{n_2} + p_2)u_2^k = (\partial_{n_2} + p_2)u_1^k & \text{sur } \Gamma \end{array} \right.$$

où les paramètres p_1 et p_2 sont des réels. Cependant Lions précise qu'il est possible de remplacer ces deux réels par deux fonctions proportionnelles sur l'interface, ou encore par des opérateurs locaux ou non-locaux. De manière générale, en introduisant deux opérateurs Λ_1 et Λ_2 , les conditions de transmission proposées par Lions peuvent alors s'écrire :

$$(\partial_{n_1} + \Lambda_1)u_1^k = (\partial_{n_1} + \Lambda_1)u_2^{k-1} \quad (\partial_{n_2} + \Lambda_2)u_2^k = (\partial_{n_2} + \Lambda_2)u_1^k \quad \text{sur } \Gamma \quad (3.5)$$

Il reste cependant à définir la méthodologie pour choisir les opérateurs Λ_1 et Λ_2 . Un choix judicieux de ces opérateurs doit assurer une convergence rapide de l'algorithme tout en imposant la consistance (continuité, dérivabilité, égalité des flux, ...) requise à l'interface. Ce choix fait appel à la notion de condition aux limites absorbante introduite dans Engquist & Majda (1977). Ce type de conditions limites est utilisé dans la résolution des équations aux dérivées partielles définies sur un domaine non borné. Ces conditions sont imposées sur une frontière artificielle de telle sorte que la solution dans le domaine restreint soit la plus proche possible de la solution dans le domaine infini. Dans Nataf *et al.* (1994), il est montré que l'utilisation de conditions de raccord absorbantes conduit à une vitesse de convergence optimale. Toutefois ces opérateurs optimaux du point de vue de la vitesse de convergence correspondent souvent à des opérateurs de transmission non-locaux, et donc compliqués à mettre en oeuvre. Différentes méthodes basées sur l'approximation de ces opérateurs non

3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz

locaux par des opérateurs locaux, plus faciles à implémenter, ont été proposées. Pour un problème d'advection-diffusion stationnaire, Charton *et al.* (1991) ont proposé de faire un développement du symbole des opérateurs optimaux (non locaux) autour du coefficient de diffusion supposé petit. Sur le même type de problème, Nataf *et al.* (1994) trouvent un opérateur local en faisant une approximation basses fréquences, à savoir un développement de Taylor autour de la variable de la transformée de Fourier.

Une méthodologie plus générale a été introduite dans Japhet (1997) et Japhet & Nataf (2000) pour approcher au mieux les opérateurs optimaux dans l'espace de Fourier. L'idée est d'optimiser le facteur de convergence sur une classe d'opérateurs locaux : on parle d'*algorithme de Schwarz optimisé* (voir aussi Gander *et al.*, 2001). Cette méthode consiste à résoudre un problème d'optimisation afin de choisir Λ_1 et Λ_2 pour minimiser le facteur de convergence de l'algorithme, que l'on notera ρ (défini comme le rapport entre les erreurs à deux itérations successives). Cependant, dans la plupart des cas, il n'est pas aisé de calculer analytiquement le taux de convergence. Il faut donc faire un certain nombre d'hypothèses simplificatrices en considérant par exemple des sous-domaines de taille infinie et en supposant d'éventuels coefficients variables comme constants. Notons qu'il est aussi possible d'optimiser en modifiant les opérateurs Λ_j à chaque itération (Gander & Golub, 2003).

3.1.2 Algorithme de Schwarz pour des problèmes d'évolution

L'algorithme de Schwarz a été étendu aux problèmes d'évolution en temps dans un premier temps sous la forme d'un algorithme *local en temps*. Cette méthode consiste à discrétiser l'équation en temps et à résoudre à chaque pas de temps un problème stationnaire (Cai, 1991). Ce genre de méthodologie nécessite une discrétisation en temps implicite et l'utilisation d'un pas de temps identique sur tous les sous-domaines, ce qui empêche de traiter numériquement chaque sous-domaine avec une procédure adaptée. En effet, si les sous-domaines ne résolvent pas la même physique, on souhaitera sans doute les traiter différemment au niveau numérique. De plus, sur une architecture parallèle, ce type de méthode n'est pas optimale car on échange (fréquemment) peu d'informations entre les sous-domaines.

Pour notre problématique océan-atmosphère, nous souhaitons conserver les schémas en temps déjà présents dans les modèles et tirer profit de la parallélisation des codes existants. Une méthode beaucoup plus appropriée pour notre problématique a été introduite dans

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

Gander & Stuart (1998) en suivant le principe de l'algorithme dit de *relaxation d'onde* (introduit par Picard en 1893) dont une version parallèle est présentée dans Lelarasmee *et al.* (1982). Ce travail préliminaire a été effectué sur l'équation de la chaleur, avec des sous-domaines se recouvrant et échangeant des conditions de type *Dirichlet*.

L'algorithme de relaxation d'onde présenté dans Lelarasmee *et al.* (1982) vise à résoudre un problème aux conditions initiales du type $F\left(\frac{dy}{dt}(t), y(t)\right) = 0$ ($y \in \mathbb{R}^p$ et $F : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^q$) sur un intervalle $[0, T]$ avec une condition initiale $y_0 = y(0)$. Ce problème est résolu en deux étapes :

1. Séparation du problème de départ en m sous-problèmes disjoints. Le nouveau problème s'écrit alors

$$\begin{bmatrix} F_1\left(\frac{dy_1}{dt}(t), y_1(t), d_1\right) \\ \vdots \\ F_m\left(\frac{dy_m}{dt}(t), y_m(t), d_m\right) \end{bmatrix} = 0 \quad (3.6)$$

où les vecteurs d_i correspondent à des vecteurs de découplage qui rendent possible la résolution séparée des sous-problèmes et y_1, \dots, y_m sont des sous-vecteurs de y .

2. Résolution, de manière itérative, du problème transformé (3.6) par une méthode du type *Gauss-Seidel* ou *Jacobi*. Les étapes de cette résolution sont :
 - **Initialisation** : on choisit $y^0(t), t \in [0, T]$ tel que $y^0(0) = y_0$.
 - **Pour une itération k** : on résout sur $[0, T]$

Pour i allant de 1 à m

$$\begin{cases} F_i\left(\frac{dy_i^k}{dt}(t), y_i^k(t), d_i^k\right) = 0 \\ y_i^k(0) = y_0 \end{cases} \quad (3.7)$$

Pour une méthode de type *Gauss-Seidel*, on met à jour d_i^k pour chaque i .

Pour une méthode de type *Jacobi*, on met à jour d_i^k lorsque tous les m sous-problèmes à une itération k ont été résolus.

L'analogie entre cette méthode de relaxation d'onde et les méthodes de décomposition de domaine a été faite dans Bjorhus (1995). L'adaptation de cette méthode permet la dérivation d'un algorithme de Schwarz *global en temps* pour des problèmes d'évolution, appelé *Schwarz Waveform Relaxation*. On résout en espace et en temps les équations sur chaque sous-domaine

3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz

(en parallèle) et on transmet les informations pertinentes aux voisins à la fin de l'intervalle de temps. Les informations échangées sont des fonctions des variables d'interface et du temps. Notons que sur chaque sous-domaine la discrétisation en temps peut être différente. A l'image du cas stationnaire, les conditions de transmission entre les sous-domaines doivent faire l'objet d'une attention toute particulière pour assurer de bonnes propriétés de convergence. On peut ainsi appliquer le même principe d'optimisation que dans le cas stationnaire, ce qui donne lieu à des algorithmes de Schwarz optimisés *globaux en temps* (*Optimized Schwarz Waveform Relaxation*), dont une revue pour l'équation d'advection-diffusion peut être trouvée dans Gander & Halpern (2007).

3.1.3 Optimisation des conditions de transmission

Nous proposons maintenant d'entrer dans les détails de l'optimisation des conditions de transmission. De manière générale, nous noterons \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 les opérateurs de transmission. Dans le cas des conditions (3.5) nous avons, par exemple, $\mathcal{C}_j = \partial_n + \Lambda_j$. On souhaite déterminer les opérateurs Λ_j qui minimisent un facteur de convergence ρ . En général, le facteur de convergence est exprimé après transformée de Fourier en espace ($x \leftrightarrow k$) et/ou en temps ($t \leftrightarrow \omega$) suivant les problèmes abordés.

Si l'on note $\eta = k$ ou ω , suivant les cas, on souhaite trouver les opérateurs \mathcal{C}_j dans une certaine classe \mathcal{C} d'opérateurs tels que le facteur de convergence ρ soit minimisé sur une gamme de fréquences donnée, ce qui revient à résoudre le problème

$$\min_{\mathcal{C}_j \in \mathcal{C}} \left(\max_{\eta \in [\eta_{\min}, \eta_{\max}]} \rho(\eta, \mathcal{C}_j) \right) \quad (3.8)$$

Différentes classes d'opérateurs ont été étudiées. On parle par exemple de *conditions optimisées d'ordre 2* si $\mathcal{C}_j = \partial_n + p_j \text{Id} + q_j \partial_\tau + r_j \partial_\tau^2$ avec τ le vecteur tangent à l'interface et p_j, q_j et r_j des scalaires. Ce même type de condition peut être déterminé pour des problèmes d'évolution en substituant (ou en ajoutant) aux dérivées tangentielles des dérivées temporelles. Les scalaires p_j, q_j et r_j ne pouvant pas être évalués analytiquement, ils sont donc calculés par l'intermédiaire d'une résolution numérique du problème d'optimisation (3.8). Dans certains cas, avec des opérateurs plus simples, d'ordre 0 ($\mathcal{C}_j = \partial_n + p_j \text{Id}$) ou d'ordre 1 ($\mathcal{C}_j = \partial_n + p_j \text{Id} + q_j \partial_\tau$), la résolution analytique de (3.8) est possible. Cela est fait soit de manière directe soit asymptotiquement dans des cas où seulement une transformée de

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

Fourier est effectuée (soit en espace pour des cas stationnaires 2D, soit en temps pour des cas instationnaires 1D).

Si l'on s'intéresse à des équations de type advection-diffusion (on note D_j le coefficient de diffusion et a_j celui d'advection sur Ω_j) ou diffusion, sans recouvrement, sur deux sous-domaines, un certain nombre de résultats existent. Pour l'équation d'advection-diffusion stationnaire en 2D et à coefficients constants ($a_1 = a_2$ et $D_1 = D_2$), des conditions optimisées d'ordre 0, avec $p_1 = p_2 = p$ (cas *one-sided*) sont données dans Dubois (2007), ainsi que des résultats asymptotiques (pour $k_{\min} = 0$) pour $p_1 \neq p_2$ (cas *two-sided*). Dans Dubois (2007) on trouve également des conditions optimisées *two-sided* d'ordre 0 pour l'équation de diffusion stationnaire avec des coefficients de diffusion discontinus et constants sur chaque sous-domaine ($D_1 \neq D_2$). En ce qui concerne le cas instationnaire, pour l'équation d'advection-diffusion avec $a_1 = a_2$ et $D_1 = D_2$ des conditions optimisées *one-sided* d'ordre 0 sont proposées dans Gander & Halpern (2007). Un cas plus général, avec $a_1 \neq a_2$ et $D_1 \neq D_2$ est traité dans Gander *et al.* (2005). Dans cet article des résultats asymptotiques sont trouvés pour $\omega_{\max} \rightarrow \infty$ et $a_1, a_2 > 0$ dans deux cas : un premier avec $p_1 = p_2$, et un second avec $p_1 \neq p_2$ mais $D_1 = D_2$. De plus, dans Gander & Halpern (2003), des conditions optimisées *one-sided* d'ordre 0 et d'ordre 1 pour l'équation de diffusion à coefficients continus ($D_1 = D_2$) sont trouvées. Une synthèse de ces différents travaux est présentée dans le tableau 3.1.

Notons que dans le cas stationnaire en une dimension, il n'est pas nécessaire de passer par une transformée de Fourier. Dans ce cas, les opérateurs Λ_j absorbants peuvent être déterminés de manière exacte dans l'espace physique. Pour l'équation de diffusion à coefficients variables $D_j = D_j(x)$, on a $\Lambda_j = p_j = \left(\int_{\Omega_j} D_j(x)^{-1} dx \right)^{-1}$ comme proposé dans Lions (1990).

Dans ce chapitre et dans le chapitre 4 nous présentons deux articles, Lemarié *et al.* (2008a) et Lemarié *et al.* (2008b) soumis pour publication à *SIAM Journal on Scientific Computing*. En avant-propos des résumés des principaux résultats de ces articles sont effectués. La première étude présentée ici vise à déterminer les paramètres de Robin optimaux pour une approximation locale *two-sided* d'ordre 0 des conditions optimales non-locales pour un problème instationnaire de diffusion avec $D_1 \neq D_2$. Il s'agit donc d'une généralisation des travaux effectués dans Dubois (2007) dans le cas stationnaire et d'une étape supplémentaire vers l'étude de l'équation d'advection-diffusion entreprise dans Gander *et al.* (2005). On pourra se référer

3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz

au tableau 3.1 pour situer ce travail par rapport aux différentes études existantes. Comme nous l'avons mentionné les démonstrations de convergence sont généralement effectuées en considérant des domaines de calcul de taille infinie : nous discuterons de la validité de cette hypothèse simplificatrice à la fin de ce chapitre. Enfin nous introduirons une méthodologie basée sur les méthodes de contrôle optimal pour procéder à l'optimisation des paramètres de Robin directement au niveau discret.

Dans le chapitre 4 nous incluons un second article qui correspond à une étude détaillée de l'impact sur la vitesse de convergence de la variabilité spatiale des coefficients de diffusion. A notre connaissance cette variabilité des coefficients (aussi bien d'advection que de diffusion) n'a jamais été étudiée de manière analytique.

Résumé des résultats de l'article "Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 1 : the constant coefficients case"

L'étude porte sur le couplage de deux équations de diffusion à coefficients constants sur chaque sous-domaine et discontinus à l'interface. Nous nous intéressons uniquement au cas de deux sous-domaines. Dans un premier temps, le problème de couplage et la théorie des méthodes de Schwarz optimisées pour des problèmes d'évolution sont introduits. Nous montrons clairement l'intérêt d'utiliser des conditions de type *Robin-Robin* (du type de celles présentées dans (3.5)) plutôt que des conditions "classiques" de type *Dirichlet-Neumann*.

Notre objectif est de résoudre analytiquement le problème de minmax (3.8) sur une classe d'opérateurs d'ordre 0. Afin d'introduire sur un cas simple la méthodologie de résolution du problème d'optimisation, nous étudions en préambule des conditions de type *Robin-Neumann* (i.e. $p_1 = 0$ ou $p_2 = 0$) ; ce problème correspond à une optimisation sur un unique paramètre. Nous déterminons le paramètre optimal dans ce cas en montrant que le facteur de convergence optimisé satisfait une propriété d'équioscillation à deux points.

Nous abordons ensuite le cas général *two-sided* qui est beaucoup plus délicat à traiter analytiquement. Nous montrons dans un premier temps que le facteur de convergence optimisé vérifie également une propriété d'équioscillation à deux points. Cependant, suivant la valeur des paramètres du problème, une équioscillation à trois points peut être obtenue et devient optimale. Pour montrer cela, nous étudions en détail le comportement du facteur de convergence en fonction des paramètres de Robin p_1 et p_2 et du spectre de fréquences temporelles $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$. Finalement nous sommes en mesure de proposer, dans un cadre général

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

	stationnaire 2D	instationnaire 1D
$a_j = 0 \quad D_1 = D_2$	AN : O0, <i>2-sided</i> (Dubois, 2007)	AN : O0, O1, <i>1-sided</i> (Gander & Halpern, 2003)
$a_j = 0 \quad D_1 \neq D_2$	AN : O0, <i>2-sided</i> (Dubois, 2007)	AN : O0, <i>2-sided</i> (Lemarié <i>et al.</i> , 2008a)
$a_1 = a_2 \quad D_1 = D_2$	AN : O0, <i>1-sided</i> AS : O0, <i>2-sided</i> (Dubois, 2007)	AN : O0, <i>1-sided</i> (Gander & Halpern, 2007)
$a_1 \neq a_2 \quad D_1 = D_2$		AS : O0, <i>2-sided</i> (Gander <i>et al.</i> , 2005)
$a_1 \neq a_2 \quad D_1 \neq D_2$		AS : O0, <i>1-sided</i> (Gander <i>et al.</i> , 2005)

Tab. 3.1: Synthèse des différents travaux existants pour l'optimisation de la vitesse de convergence pour des équations de type advection-diffusion. On note O0 pour une approximation d'ordre 0, O1 pour une approximation d'ordre 1, **AN** lorsque l'approximation est effectuée analytiquement et **AS** lorsque les résultats sont obtenus asymptotiquement.

3.1 Avant-propos sur l'algorithme de Schwarz

(i.e. sans hypothèses sur les valeurs des paramètres du problème), les valeurs optimales des paramètres de Robin p_1 et p_2 correspondant à une approximation locale d'ordre 0 des conditions optimales non-locales de transmission. L'étude menée étend le cadre méthodologique proposé par Dubois (2007) dans le cas stationnaire aux problèmes d'évolution.

Si l'on s'intéresse à l'évolution du facteur de convergence optimisé en fonction des paramètres du problème, nous constatons que la vitesse de convergence augmente lorsque la discontinuité des coefficients à l'interface augmente également. A contrario, plus la gamme de fréquences temporelles présentes est large (i.e. plus le ratio $\frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}$ est grand) plus la vitesse de convergence est lente. Celle-ci n'est donc pas indépendante du pas de temps utilisé lors de la discrétisation du problème continu.

TOWARDS AN OPTIMIZED GLOBAL-IN-TIME SCHWARZ ALGORITHM FOR DIFFUSION EQUATIONS WITH DISCONTINUOUS AND SPATIALLY VARIABLE COEFFICIENTS

PART 1 : THE CONSTANT COEFFICIENTS CASE

FLORIAN LEMARIÉ *, LAURENT DEBREU[†], AND ERIC BLAYO[‡]

Abstract. In this paper we present a global-in-time non-overlapping Schwarz method applied to the one dimensional unsteady diffusion equation. We address specifically the problem with discontinuous diffusion coefficients, our approach is therefore especially designed for subdomains with heterogeneous properties. We derive efficient interface conditions by solving analytically the min-max problem associated to the search of optimized conditions in a *Robin-Neumann* case and in a *two-sided Robin-Robin* case.

Key words. domain decomposition, waveform relaxation, Schwarz methods

AMS subject classifications. 65M55, 35K15, 76F40

1. Introduction. A number of geophysical phenomena, which may have a strong societal impact, involve the coupled ocean-atmosphere system (e.g. climate change, tropical cyclones...). It is therefore often necessary to couple numerical models of the ocean and of the atmosphere. However, connecting the two model solutions at the air-sea interface is a difficult problem, which is presently often addressed in a simplified way from a mathematical point of view. Indeed the fluxes exchanged by the two models are generally not in exact balance. This kind of coupling raises a number of challenges in terms of numerical simulation since we are considering two highly turbulent fluids with widely different scales in time and space. It is thus natural to use some specific numerical treatment to match the physics of the two fluids at their interface. It is known that, even if numerical models are much more complicated, a simple one-dimensional diffusion equation can locally satisfactorily approximate the main features of the flux exchanges between both fluids in the vertical direction. The corresponding diffusion coefficients are given by an *eddy-viscosity* closure which predicts strongly spatially variable diffusion coefficients, see [15]. In order to perform this coupling in a more consistent way than *ad-hoc* methods, we propose to adapt a global-in-time domain decomposition based on optimized Schwarz method, described in [8] and designed thanks to the pioneering works [5] and [16], to our configuration with discontinuous and spatially variable coefficients. Indeed Schwarz-like domain decomposition methods provide flexible and efficient tools for coupling models with non-conforming time and space discretizations [2]. To circumvent the divergence of the classical Schwarz method in the case of non-overlapping subdomains, new transmission conditions of Robin type have been proposed in [13]. Then, thanks to the free parameters associated to the use of Robin conditions, an optimization of the con-

* Corresponding author, University of Grenoble, Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (florian.lemarie@imag.fr, phone : +33 4 76 63 54 98, fax : +33 4 76 63 12 63)

[†]INRIA Grenoble Rhône-Alpes, Montbonnot, 38334 Saint Ismier Cedex, France and Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (laurent.debreu@imag.fr, phone : +33 4 76 51 48 60, fax : +33 4 76 63 12 63)

[‡]University of Grenoble, Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (eric.blayo@imag.fr, phone : +33 4 76 63 59 63, fax : +33 4 76 63 12 63)

vergence speed has been proposed in [10] and [16], which is the basis of the so called *optimized Schwarz methods* (OSM). This kind of method, originally introduced for stationary problems has been extended to unsteady cases by adapting the waveform relaxation algorithms (see [11] and [5]), to provide a *global-in-time optimized Schwarz method*. This notion of optimization of the convergence speed is critical in the context of ocean-atmosphere coupling as the numerical codes which are involved are very expensive from a computational point of view. In the present series of two papers, we intend to derive interface conditions leading to an efficient Schwarz coupling algorithm between two unsteady diffusion equations. The convergence properties of this kind of problem have already been extensively studied in the case of a constant diffusion coefficient having the same value in all subdomains [6]. Moreover there exists a few results in the case of coefficients taking different constant values in the different subdomains [7] (in the more general case of advection-diffusion-reaction equations). In the present papers, we extend these studies to the general case of diffusion coefficients which vary in each subdomain and whose values are different on both sides of the interface.

In this first paper we consider the case of diffusion coefficients which are constant in each medium, but discontinuous at their interface. We study a zeroth order *two-sided* optimized method by considering two different Robin conditions on both sides of the interface. In the second paper [12], the impact of the spatial variability in each medium of the diffusion coefficients on the convergence speed is studied.

This first paper is organized as follows. In section 2, we recall the basics of optimized Schwarz methods in the framework of time evolution problems. Sections 3 and 4 are dedicated to the study of two algorithms in the case of discontinuous but constant in each subdomain coefficients. In section 3 we determine the minimax problem solution for a simplified algorithm with only one Robin condition combined with a Neumann condition. Finally in section 4, we address the more general case of *two-sided* optimized Robin-Robin transmission conditions, which are determined through a study of the behaviour of the convergence factor.

2. Model problem and Optimized Schwarz Methods. Our guiding example is the one dimensional diffusion equation

$$\mathcal{L}u = \partial_t u - \partial_x(D(x)\partial_x u) = f \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (2.1)$$

with $\Omega =]-L_1, L_2[$, ($L_1, L_2 \in \mathbb{R}^+$) and $D(x) > 0, x \in \Omega$. This problem is complemented by an initial condition

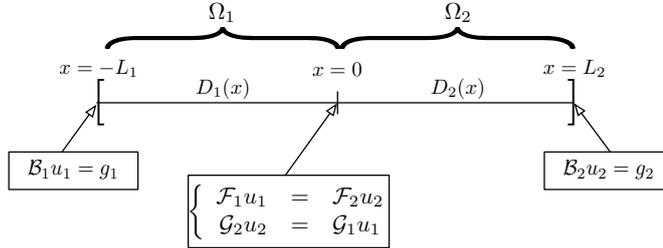
$$u(x, 0) = u_0(x) \quad x \in \Omega, \quad (2.2)$$

and boundary conditions

$$\mathcal{B}_1 u(-L_1, t) = g_1 \quad \mathcal{B}_2 u(L_2, t) = g_2 \quad t \in [0, T]. \quad (2.3)$$

where \mathcal{B}_1 and \mathcal{B}_2 are partial differential operators.

In the whole paper we assume that $u_0 \in H^1(\Omega)$, $f \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$, and $D(x)$ bounded in L^∞ -norm. Note that, in actual applications, such assumptions are generally fulfilled. Existence and uniqueness results for this problem can be proved following [7].

FIG. 2.1. Decomposition of the spatial domain Ω into two non-overlapping subdomains.

2.1. Formulation of global-in-time Schwarz method. Let us now consider a case with discontinuous diffusion coefficients which could be representative of a coupling between media with heterogeneous physical properties. In this case each subdomain has its own diffusion profile $D_j(x)$, ($j = 1, 2$). This corresponds to a splitting of our domain Ω into two non-overlapping domains Ω_1 and Ω_2 (as described on figure 2.1) which communicates through their common interface $\Gamma = \{x = 0\}$ (note that there can be various reasons for such a splitting: different physics, parallelization and/or different numerical treatment requirements). The non-overlapping global-in-time Schwarz algorithm consists in solving iteratively subproblems on $\Omega_1 \times [0, T]$ and $\Omega_2 \times [0, T]$ using as an interface condition at $x = 0$ the corresponding values calculated at the previous iteration on the other subdomain. The operator \mathcal{L} defined previously is separated into two operators $\mathcal{L}_j = \partial_t - \partial_x(D_j(x)\partial_x)$ restricted to Ω_j ($j = 1, 2$). If we introduce the operators \mathcal{F}_1 , \mathcal{F}_2 , \mathcal{G}_1 and \mathcal{G}_2 to define the interface conditions, the algorithm reads

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_1 u_1^k = f & \text{in } \Omega_1 \times [0, T] \\ u_1^k(x, 0) = u_o(x) & x \in \Omega_1 \\ \mathcal{B}_1 u_1^k(-L_1, t) = g_1 & t \in [0, T] \\ \mathcal{F}_1 u_1^k(0, t) = \mathcal{F}_2 u_2^{k-1}(0, t) & \text{in } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_2 u_2^k = f & \text{in } \Omega_2 \times [0, T] \\ u_2^k(x, 0) = u_o(x) & x \in \Omega_2 \\ \mathcal{B}_2 u_2^k(L_2, t) = g_2 & t \in [0, T] \\ \mathcal{G}_2 u_2^k(0, t) = \mathcal{G}_1 u_1^k(0, t) & \text{in } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right. \quad (2.4)$$

where $k = 1, 2, \dots$ is the iteration number and where the initial guess $u_2^0(0, t)$ is given.

This corresponds to the so-called "multiplicative" form of the Schwarz algorithm. If we replace the interface condition $\mathcal{G}_2 u_2^k = \mathcal{G}_1 u_1^k$ on Ω_2 by $\mathcal{G}_2 u_2^k = \mathcal{G}_1 u_1^{k-1}$, then we obtain the "parallel" version of the algorithm. The multiplicative form converges more rapidly than the parallel one but prevents from solving subproblems in parallel (this problem can be circumvented when we are considering more than two subdomains). Note that the study presented in this paper uses the multiplicative form of the algorithm but the results would be exactly the same for the parallel form. The usual algorithmic approach applied to ocean-atmosphere climate model generally corresponds to one iteration of the algorithm (2.4) without reaching the convergence, see [3].

A key point for an efficient coupling is to define a good consistency criterion on the interface Γ by the mean of operators \mathcal{F}_j and \mathcal{G}_j ($j = 1, 2$). In our context we will require the equality of the subproblems solutions and of their fluxes on the interface. The most natural choice to obtain such a connection consists in choosing

$$\mathcal{F}_1 = D_1(0) \frac{\partial}{\partial x} \quad \mathcal{F}_2 = D_2(0) \frac{\partial}{\partial x} \quad \mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_2 = Id \quad (2.5)$$

However as proposed in [13], in order to optimize the convergence speed, we can use mixed boundary conditions of Robin type

$$\mathcal{F}_j = D_j(0) \frac{\partial}{\partial x} + \Lambda_1 \quad \mathcal{G}_j = D_j(0) \frac{\partial}{\partial x} + \Lambda_2 \quad (j = 1, 2) \quad (2.6)$$

This type of condition has the advantage to add operators, Λ_1 and Λ_2 , in our coupled problem, which can greatly improve the convergence speed if correctly chosen, as we will see later. In this paper we will focus our attention on *Robin-Robin* type of transmission conditions since *Dirichlet-Neumann* type algorithms converge quite slowly, except for large discontinuities between the coefficients D_2 and D_1 (the convergence rate is given by the ratio between D_1 and D_2).

We have now formulated the coupling problem that we want to address. As mentioned previously, the convergence properties of this kind of problem have been extensively studied in the case of constant and continuous diffusion coefficients [6], and there exists also a few results in the case of constant and discontinuous coefficients [7] in the more general case of advection-diffusion-reaction equations.

In this first paper we propose to investigate the problem with diffusion coefficients which are constant on each subdomain and discontinuous at the interface, i.e. $D_j(x) = D_j$, with $D_j > 0$ and $D_1 \neq D_2$. In this case we will be able to prove the convergence of algorithm (2.4) and to determine optimal choices for the Λ_j operators, under some constraints on the parameters of the problem.

2.2. Convergence of the algorithm. A classical approach to demonstrate the convergence of the algorithm is to introduce the error e_j^k between the exact solution u^* and the iterates u_j^k , $j = 1, 2$. If we consider our model problem (2.4) with constant coefficients, by linearity the system satisfied by e_1^k and e_2^k is a homogeneous diffusion equation with homogeneous initial condition :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial e_1^k}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1 \frac{\partial e_1^k}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_1 \times [0, T] \\ e_1^k(x, 0) = 0 & x \in \Omega_1 \\ \mathcal{B}_1 e_1^k(-L_1, t) = 0 & t \in [0, T] \\ (D_1 \partial_x + \Lambda_1) e_1^k(0, t) = (D_2 \partial_x + \Lambda_1) e_2^{k-1}(0, t), & \text{in } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right. \quad (2.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial e_2^k}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2 \frac{\partial e_2^k}{\partial x} \right) = 0 & \text{in } \Omega_2 \times [0, T] \\ e_2^k(x, 0) = 0 & x \in \Omega_2 \\ \mathcal{B}_2 e_2^k(L_2, t) = 0 & t \in [0, T] \\ (D_2 \partial_x + \Lambda_2) e_2^k(0, t) = (D_1 \partial_x + \Lambda_2) e_1^k(0, t), & \text{in } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right.$$

The following part of our analysis is based on a Fourier transform in time denoted for any $g \in L^2(\mathbb{R})$ by $\hat{g} = \mathcal{F}(g)$, by considering $T \rightarrow \infty$. Note that in our study all the functions are chosen equal to zero for negative time. By a Fourier transform in time the partial differential equations (2.7) reduce to the following ordinary differential equations

$$i\omega \hat{e}_j^k - D_j \frac{\partial^2 \hat{e}_j^k}{\partial x^2} = 0 \quad j = 1, 2 \quad (2.8)$$

For $\omega \in \mathbb{R}^*$ the characteristic roots are

$$\sigma_j^+ = \sqrt{\frac{i\omega}{D_j}} = \sqrt{\frac{|\omega|}{2D_j}} (1 + \frac{|\omega|}{\omega} i) \quad \text{and} \quad \sigma_j^- = -\sigma_j^+ \quad (2.9)$$

To simplify the study, we assume that $L_1, L_2 \rightarrow \infty$ and that e_j tends to zero for $x \rightarrow \infty$ we find that

$$\widehat{e}_1(x, \omega) = \alpha(\omega)e^{\sigma_1^+ x} \quad \widehat{e}_2(x, \omega) = \beta(\omega)e^{\sigma_2^- x} \quad (2.10)$$

Note that the particular case $\omega = 0$ would correspond to the existence of a stationary part in the error. However, since the error is initially zero, such a stationary part is also necessarily zero.

The functions $\alpha(\omega)$ and $\beta(\omega)$ are determined using Robin interface conditions at $x = 0$. If we define λ_j as the *symbol* of operators Λ_j ($j = 1, 2$), i.e.

$$\forall g \in L^2(\mathbb{R}) \quad \widehat{\Lambda_j g}(\omega) = \lambda_j(\omega)\widehat{g}(\omega) \quad \forall \omega \in \mathbb{R}^* \quad (2.11)$$

α and β at iteration k satisfy the equalities

$$\begin{cases} (D_1\sigma_1^+ + \lambda_1)\alpha^k(\omega) &= (D_2\sigma_2^- + \lambda_1)\beta^{k-1}(\omega) \\ (-D_2\sigma_2^- + \lambda_2)\beta^k(\omega) &= (-D_1\sigma_1^+ + \lambda_2)\alpha^k(\omega) \end{cases} \quad (2.12)$$

We can define a convergence factor ρ of the Schwarz algorithm by

$$\rho(\omega) = \left| \frac{\widehat{e}_1^k(0, \omega)}{\widehat{e}_1^{k-1}(0, \omega)} \right| = \left| \frac{\widehat{e}_2^k(0, \omega)}{\widehat{e}_2^{k-1}(0, \omega)} \right| \quad (2.13)$$

Therefore, given (2.10), $\rho(\omega) = \left| \frac{\alpha^k(\omega)}{\alpha^{k-1}(\omega)} \right| = \left| \frac{\beta^k(\omega)}{\beta^{k-1}(\omega)} \right|$. Using (2.12) we obtain

$$\rho(\omega) = \left| \frac{(\lambda_1(\omega) + D_2\sigma_2^-)(\lambda_2(\omega) - D_1\sigma_1^+)}{(\lambda_1(\omega) + D_1\sigma_1^+)(\lambda_2(\omega) - D_2\sigma_2^-)} \right| \quad (2.14)$$

At this point, we are not able to conclude on the convergence (or the divergence) of our algorithm because the operators Λ_j have not been explicitly determined. As we will see in the next section, this is often a difficult task to choose them in an appropriate way. The main difficulty comes from the fact that the convergence factor is formulated in the Fourier space, which leads to act on symbols λ_j but not directly on pseudo-differential operators Λ_j in the physical space.

2.3. Optimized Schwarz Method. The question we intend to adress in this section is: how to choose the transmission conditions in order to obtain the quickest possible convergence ? According to (2.14) we can easily see that the most effective symbols are those which cancel the convergence factor. Therefore they ensure a convergence in only two iterations. Their expressions read

$$\lambda_1^{\text{opt}} = -D_2\sigma_2^- = \sqrt{\frac{|\omega|D_2}{2}}\left(1 + \frac{|\omega|}{\omega}i\right) \quad \lambda_2^{\text{opt}} = D_1\sigma_1^+ = \sqrt{\frac{|\omega|D_1}{2}}\left(1 + \frac{|\omega|}{\omega}i\right) \quad (2.15)$$

These symbols correspond to so-called *absorbing conditions*. Unfortunately, since these optimal symbols are not polynomials in $i\omega$, the absorbing conditions are non local in time in the physical space. Indeed

$$\Lambda_j u_j(x, t) = \mathcal{F}^{-1}(\lambda_j) * u_j(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{F}^{-1}(\lambda_j)(\tau) u_j(x, t - \tau) d\tau \quad (2.16)$$

As a consequence, the new problem now is to find local operators which are a good approximation of nonlocal ones. By noting that

$$\forall f \in C^n \cap L^1(\mathbb{R}), k \in \llbracket 1, n \rrbracket \quad \widehat{f^{(k)}}(\xi) = (i\omega)^k \widehat{f}(\xi) \quad (2.17)$$

the aim is thus to find a polynomial form in $i\omega$ which is a good approximation of λ_j^{opt} . There are mainly two approaches for such an approximation. The first one consists in a low frequency approximation, namely a Taylor expansion for a small ω , but this methodology is irrelevant in our study because we want to be able to consider a wide range of frequencies. The second and more sophisticated approach is to solve a minimax problem in order to determine local operators that optimize the convergence speed over the full range of frequencies $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$. For a zeroth order approximation we look for parameters $p_j \in \mathbb{R}$ such that $\lambda_j^{\text{opt}} \approx p_j$, which are solutions of the optimization problem

$$\min_{p_1, p_2 \in \mathbb{R}} \left(\max_{\omega \in [\omega_{\min}, \omega_{\max}]} \rho(p_1, p_2, \omega) \right) \quad (2.18)$$

Because in practice we are working on a discrete problem the frequencies allowed by our temporal grid range from $\omega_{\min} = \frac{\pi}{T}$ to $\omega_{\max} = \frac{\pi}{\Delta t}$ where Δt is the time step.

Similarly, looking for a first order approximation would consist in making the approximation $\lambda_j^{\text{opt}} \approx p_j + i\omega q_j$, and solving $\min_{p_j, q_j \in \mathbb{R}} \left(\max_{\omega \in [\omega_{\min}, \omega_{\max}]} \rho(p_1, p_2, q_1, q_2, \omega) \right)$. The analytical resolution of problem (2.18) is not an easy task: indeed the minimisation of a maximum is known to be one of the most difficult problem in optimization theory. On top of that, we are working on an optimization for two parameters p_1 and p_2 (4 parameters for the first order approximation) which strengthen the difficulty. Some analytical results exist in the case of *two-sided* optimisation for 2D steady-state diffusion equation in [14] and [4], and for 2D Helmholtz equation in [9]. In [7], in the case of an advection-diffusion-reaction problem, the asymptotic solution of (2.18) for $\Delta t \rightarrow 0$ and for a positive advection is found in two particular cases: first $p_1 = p_2$ (*one-sided*), and second $p_1 \neq p_2$ (*two-sided*) but $D_1 = D_2$. In this paper we intend to study the complete minmax problem (2.18), without asymptotic development and in the general case $p_1 \neq p_2$ and $D_1 \neq D_2$.

Solving numerically the previous minimax problems is quite expensive from a computational point of view, and this optimization must be performed for any change in the values of D_1 and D_2 . That is why we intend in the following to find an analytical solution in the case of a zeroth order approximation. This will be done with two different sets of interface conditions, namely *Neumann-Robin* and *Robin-Robin*.

3. Optimized Schwarz method with *Neumann-Robin* interface conditions. It sometimes happens that one of the two subdomains corresponds to a model seen as a "blackbox", which inputs and outputs are fluxes (i.e. Neumann conditions). This may be the case for example when one has to couple his own model with an "external" model the source code of which he cannot access or he does not want to modify.

In this section, we will assume that the solution in Ω_2 is subject to a Neumann boundary condition. This relatively easy case is also treated separately because it introduces several basic ideas of the more general Robin-Robin interface conditions. Imposing a Neumann boundary condition for the solution u_2 on Γ corresponds to the

choice of $\Lambda_2 = 0$ in the previous general formulation. The convergence factor ρ_{NR} (NR stands for "Neumann-Robin"), obtained from (2.14), reduces to

$$\rho_{\text{NR}} = \left| \frac{D_1 \sigma_1^+ (D_2 \sigma_2^- + \lambda_1)}{D_2 \sigma_2^- (D_1 \sigma_1^+ + \lambda_1)} \right| \quad (3.1)$$

Introducing $\zeta = \sqrt{|\omega| D_1}$, $\gamma = \sqrt{\frac{D_2}{D_1}}$, $\lambda_1 = \frac{\sqrt{\zeta_{\min} \zeta_{\max}}}{2} p$ ($p \in \mathbb{R}$), and using the expression (2.9) for σ_1^+ and σ_2^- , we obtain

$$\rho_{\text{NR}}(p, \zeta) = \frac{1}{\gamma} \sqrt{\frac{(p - \gamma \zeta)^2 + \gamma^2 \zeta^2}{(p + \zeta)^2 + \zeta^2}} \quad (3.2)$$

with $\zeta = \zeta / \sqrt{\zeta_{\max} \zeta_{\min}}$.

It can easily be shown that for $p > 0$, $\gamma > 0$ and $\zeta > 0$ we have $\rho_{\text{NR}}(p, \zeta) < \rho_{\text{NR}}(-p, \zeta)$. We can thus assume that p is strictly positive for our study. We define an additional parameter $\mu = \sqrt{\zeta_{\max} / \zeta_{\min}}$, we thus get that ζ varies between $\zeta_{\min} = \mu^{-1}$ and $\zeta_{\max} = \mu$.

We now aim at optimizing the convergence speed, by finding p^* the solution of the minimax problem:

$$\min_{p > 0} \left(\max_{\zeta \in [\mu^{-1}, \mu]} \rho_{\text{NR}}(p, \zeta) \right). \quad (3.3)$$

THEOREM 3.1 (Optimized Robin parameter). *The analytical solution of the minimax problem (3.3) is given by*

$$p^* = \frac{1}{2} \left(-v^* + \sqrt{8\gamma + (v^*)^2} \right) \quad (3.4)$$

where

$$v^* = (1 - \gamma)\beta, \text{ with } \beta = \mu + 1/\mu$$

Proof: first we study the behaviour of the derivative of ρ_{NR} with respect to ζ and p (with $\zeta \geq 0$ and $p \geq 0$). We define the variable q by $q = p / (\gamma - 1 + \sqrt{1 + \gamma^2})$. q will not be used in the computations but simplifies the proof of the two followings properties: restriction of the parameter range and equioscillation property.

Restriction of the parameters range. We get that

$$\text{Sign} \left(\frac{\partial \rho_{\text{NR}}}{\partial p} \right) = \text{Sign}(q - \zeta) \quad (3.5)$$

Looking at the sign of the derivative of ρ_{NR} with respect to p , it appears that, for all values of ζ , ρ_{NR} is a decreasing function of p for $q < \zeta_{\min} = \mu^{-1}$. This proves that $q^* \geq \zeta_{\min}$. A similar argument shows that $q^* \leq \zeta_{\max}$. This shows that the optimized parameter q^* must satisfy

$$1/\mu \leq q^* \leq \mu \quad (3.6)$$

Along with (3.5), this shows that the convergence factor has to be a decreasing function of p at $\zeta = 1/\mu$ and an increasing function of p at $\zeta = \mu$.

Equioscillation property. Let's have a look at the derivative of ρ_{NR} with respect to ζ .

$$\text{Sign} \left(\frac{\partial \rho_{\text{NR}}}{\partial \zeta} \right) = \text{Sign} (\zeta - q) \quad (3.7)$$

This relation implies that ρ_{NR} has a local minima between μ^{-1} and μ . The maximum value of the convergence factor is thus attained either at $\zeta = 1/\mu$ or at $\zeta = \mu$ (or both). If we assume $\rho_{\text{NR}}(p, \mu^{-1}) < \rho_{\text{NR}}(p, \mu)$ it is always possible to decrease the maximum value of $\rho_{\text{NR}}(p, \zeta)$ by decreasing the value of p so that we must have $\rho_{\text{NR}}(p, 1/\mu) \geq \rho_{\text{NR}}(p, \mu)$.

A similar argument shows that $\rho_{\text{NR}}(p, \mu) \geq \rho_{\text{NR}}(p, 1/\mu)$. Thus the optimal parameter must satisfy the equioscillation property $\rho_{\text{NR}}(p^*, 1/\mu) = \rho_{\text{NR}}(p^*, \mu)$.

After simple computations, we find that p^* must be the solution of

$$(\gamma - 1)(\mu + 1/\mu) + \frac{2\gamma}{p^*} - p^* = 0$$

If we introduce $v^* = \frac{2\gamma}{p^*} - p^*$, $v^* = (1 - \gamma)(\mu + 1/\mu)$ and the unique positive solution of the equation $v^* = \frac{2\gamma}{p^*} - p^*$ is given by $p^* = \frac{1}{2} \left(-v^* + \sqrt{8\gamma + (v^*)^2} \right)$. ■

We found that the convergence factor satisfies an equioscillation property. This concept of equioscillation property comes from the Chebyshev's alternant theorem (or equioscillation theorem). This theorem states that for a given continuous function u on $[a, b]$, $P_u(x)$ is the best polynomial approximation of u in $\mathcal{P}_N[X]$ in the sense of the L^∞ -norm if and only if we can find $N + 2$ points x_j in $[a, b]$ such that $|u - P_u|$ is maximum for each x_j , i.e. $\forall j, |u(x_j) - P_u(x_j)| = \max_{x \in [a, b]} |u - P_u|$. The similarities between the Chebyshev's theorem and Optimized Schwarz Method are clearly exposed in [4] and [1].

A typical optimized convergence factor $\rho_{\text{NR}}(p^*)$ is shown in figure 3.1 for $\gamma = 5$, $\mu = 6$.

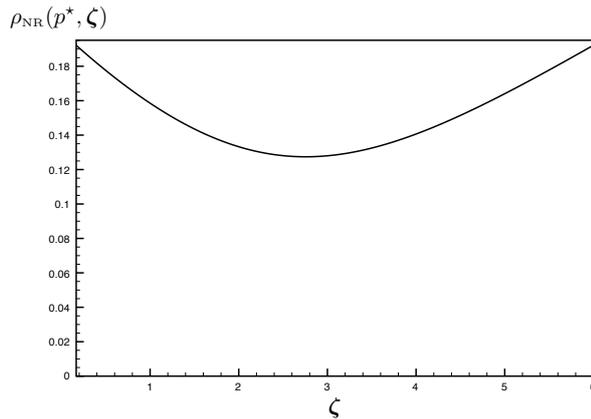


FIG. 3.1. Behaviour of $\rho_{\text{NR}}(p^*, \zeta)$ with respect to ζ , for $\gamma = 5$ and $\mu = 6$.

Figure 3.2 shows the variation with γ of the convergence factor and the optimal parameter p^* for $\mu = 2$ and $\mu = 6$. Note that the ratio between minimum and maximum

frequencies $\frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}$ is given by $\frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}} = \mu^4$ which equals 16 for $\mu = 2$ and 1296 for $\mu = 6$. We look at three particular cases: $\gamma \rightarrow 0^+$, $\gamma = 1$ and $\gamma \rightarrow \infty$.

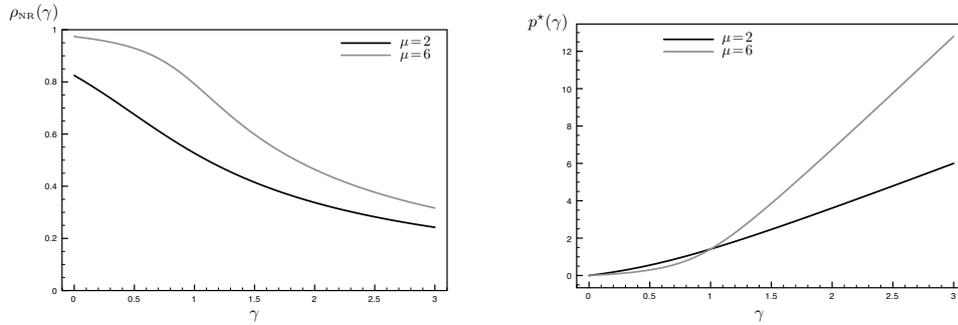


FIG. 3.2. Convergence factor (left) and optimal parameter p^* (right) for $\mu = 2$ and $\mu = 6$ as a function of γ

- $\gamma \rightarrow 0^+$ ($D_1 \gg D_2$)

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \rho_{\text{NR}}^* = \sqrt{1 - \frac{2}{\beta^2}}, \quad \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} p^* = 0$$

The minimum value of the convergence factor is attained at $\mu = 1$ (i.e. $\beta = 2$) and is equal to $\frac{\sqrt{2}}{2}$. When μ is increased, the convergence is very slow. The optimal boundary condition tends towards a Neumann-Neumann operator.

- $\gamma = 1$ ($D_1 = D_2$)

$$\rho_{\text{NR}}^* = \sqrt{\frac{\beta - \sqrt{2}}{\beta + \sqrt{2}}}, \quad p^* = \sqrt{2}$$

ρ_{NR}^* approaches 1 when μ (or β) is increased.

- $\gamma \rightarrow +\infty$ ($D_1 \ll D_2$)

$$\lim_{\gamma \rightarrow +\infty} \rho_{\text{NR}}^* = 0, \quad \lim_{\gamma \rightarrow +\infty} p^* = +\infty$$

When γ tends to $+\infty$, the convergence is very fast (the convergence factor approaches 0) and the optimal boundary condition tends towards a Neumann-Dirichlet operator. The Dirichlet boundary condition has to be imposed at the boundary of the domain with the smaller diffusion coefficient (Ω_1).

We conclude that zeroth-order optimized Neumann-Robin boundary conditions are only efficient when $D_1 \ll D_2$. In the next section, we study the zeroth-order two-sided Robin-Robin boundary conditions.

4. OSM for a diffusion problem with discontinuous (but constant) coefficients: two-sided Robin transmission conditions. Let's suppose now that we have access to both numerical codes. In this configuration the best strategy is to optimize the conditions on both sides of the interface to obtain a faster convergence speed.

By keeping the notations ζ , ζ , μ and γ defined in the previous section and by approximating λ_1^{opt} and λ_2^{opt} respectively by $\frac{\sqrt{\zeta_{\min}\zeta_{\max}}}{2}p_2$ and $\frac{\sqrt{\zeta_{\min}\zeta_{\max}}}{2}p_1$ the convergence factor ρ_{RR} reads

$$\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) = \sqrt{\frac{((p_1 - \zeta)^2 + \zeta^2)((p_2 - \gamma\zeta)^2 + \gamma^2\zeta^2)}{((p_1 + \gamma\zeta)^2 + \gamma^2\zeta^2)((p_2 + \zeta)^2 + \zeta^2)}} \quad (4.1)$$

We can easily demonstrate that, for nonnegative fixed values of ζ and γ and for $p_1, p_2 > 0$ we have $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) < \rho_{RR}(-p_1, -p_2, \zeta)$, as well as $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) < \rho_{RR}(p_1, -p_2, \zeta)$ and $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) < \rho_{RR}(-p_1, p_2, \zeta)$. Those three inequalities show that we can restrict our study to strictly positive values of p_1 and p_2 (note that $p_1 = 0$ or $p_2 = 0$ corresponds to the *Neumann-Robin* case studied previously, and that $p_1 = p_2 = 0$ leads to a *Neumann-Neumann* type algorithm).

In the following, we will suppose that $\gamma \geq 1$. The problem being now symmetric, optimal parameters p_1 and p_2 for the case $\gamma \leq 1$ can be obtained by interverting optimal values for the case $\gamma \geq 1$.

The next step is now to tune the values of the free parameters p_1 and p_2 to improve the convergence properties. As mentioned previously the most powerful way to do this is to solve the following optimisation problem

$$\min_{p_1, p_2 > 0} \left(\max_{\zeta \in [\mu^{-1}, \mu]} \rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) \right) \quad (4.2)$$

4.1. Behaviour of the convergence factor with respect to the Robin parameters. First, we propose to study the behaviour of ρ_{RR} with respect to the parameters p_1 and p_2 . Let us introduce two new parameters q_1 and q_2 defined by

$$q_1 = \frac{p_1}{1 - \gamma + \sqrt{1 + \gamma^2}} \quad q_2 = \frac{p_2}{\gamma - 1 + \sqrt{1 + \gamma^2}} \quad (4.3)$$

We first remark that for $\gamma \geq 1$ and $q_1 \leq q_2$, we have $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) \leq \rho_{RR}(p_2, p_1, \zeta)$. This proves that the optimal parameters satisfy $q_1^* \leq q_2^*$. This implies that $p_1 \leq p_2$ and that $p_1 < p_2$ if $\gamma > 1$. This immediately proves that *one-sided* ($p_1 = p_2$) Robin-Robin boundary conditions are not optimal as soon as $\gamma > 1$.

Restriction of the parameters range. It can easily be shown that $\text{Sign}\left(\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_1}\right) = \text{Sign}(q_1 - \zeta)$ and $\text{Sign}\left(\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_2}\right) = \text{Sign}(q_2 - \zeta)$. This implies that

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_1} &> 0 \text{ when } \zeta < q_1 & \frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_1} &< 0 \text{ when } \zeta > q_1 \\ \frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_2} &> 0 \text{ when } \zeta < q_2 & \frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_2} &< 0 \text{ when } \zeta > q_2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Looking at the sign of the derivatives of ρ_{RR} with respect to p_1 and p_2 , it appears that if we choose $q_1 < \zeta_{\min} = \mu^{-1}$, we can decrease the convergence factor by increasing p_1 , indeed $\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial p_1} < 0, \forall q_1 > \zeta_{\min}$. A similar argument shows that $q_2 \leq \zeta_{\max}$. This shows that the optimized parameters q_1^* and q_2^* must satisfy

$$\mu^{-1} \leq q_1^* < q_2^* \leq \mu \quad (4.5)$$

(4.4) and (4.5) imply that at $\zeta = 1/\mu$, ρ_{RR} is an increasing function of p_1 and p_2 (or q_1 and q_2) while at $\zeta = \mu$, ρ_{RR} is a decreasing function of p_1 and p_2 (or q_1 and q_2).

4.2. Extrema of ρ_{RR} with respect to ζ . The next step to solve (4.2) analytically is to find the location of the extrema of $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta, \gamma)$ with respect to ζ .

THEOREM 4.1 (Extrema of $\rho_{RR}(\zeta)$). $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta)$ has one or three positive local extrema. In the case of one extremum, it corresponds to a minimum and is located at $\chi = \sqrt{\frac{p_1 p_2}{2\gamma}}$.

Proof: We start by the following property that can easily be verified:

$$\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta) = \rho_{RR}(p_1, p_2, \chi^2/\zeta), \text{ where } \chi = \sqrt{\frac{p_1 p_2}{2\gamma}}$$

After derivation with respect to ζ , this leads to

$$\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial \zeta}(p_1, p_2, \zeta) = -\frac{\chi^2}{\zeta^2} \frac{\partial \rho_{RR}}{\partial \zeta}(p_1, p_2, \chi^2/\zeta) \quad (4.6)$$

which shows that $\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial \zeta}(p_1, p_2, \pm\chi) = 0$.

$\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial \zeta}(p_1, p_2, \zeta)$ has the sign of $P(\zeta)$ a (unitary) sixth order polynomial. Thus $P(\zeta)$

has either two or six real roots, two of them being given by $\zeta = \pm\chi$.

Let's suppose that $P(\zeta)$ has six real roots. We are going to show that only three of these six roots (including $\zeta = \chi$) are positive. From (4.6) we see that if ζ^0 is a root of $P(\zeta)$, $\zeta^1 = \chi^2/\zeta^0$ is a root too.

Let's suppose that the four other roots are positive. Then we have

$$\zeta_5 = -\chi \leq 0 \leq \zeta_6 \leq \zeta_1 \leq \zeta_2 = \chi \leq \zeta_3 (= \frac{\chi^2}{\zeta_1}) \leq \zeta_4 (= \frac{\chi^2}{\zeta_6})$$

and the sum of the six roots must be greater than 2χ . However the sum of the six roots of $P(\zeta)$ is given by $-a_5$ where a_5 is the coefficient of the ζ^5 term and is equal to $a_5 = \frac{(\gamma-1)(p_2-p_1)}{\gamma}$. Using the fact that $\gamma \geq 1$ and that (4.5) implies $p_2 \geq p_1$, $-a_5$ cannot be positive so that we conclude that we have at most three positive roots of $P(\zeta)$.

It can be verified that $P(0) < 0$ and $P(+\infty) > 0$ so that if only one positive root exist (at $\zeta = \chi$), it is a local minimum. ■

4.3. Equioscillation of ρ_{RR} at the end points. **THEOREM 4.2** (Equioscillation at the end points). *The optimized convergence factor $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \zeta)$ satisfies*

- $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \chi) \leq \max(\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu^{-1}), \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu))$
- *the equioscillation property:*

$$\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu^{-1}) = \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu) \text{ which holds only for } p_1^* p_2^* = 2\gamma$$

Proof: We first demonstrate that $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \chi) \leq \max(\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu^{-1}), \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu))$.

If χ is the only positive root of $\frac{\partial \rho_{RR}}{\partial \zeta}(\zeta)$, this is trivial since χ is a local minimum.

Let's look at the case where there are three positive roots, in this case χ is a local maximum.

From the identity $\chi = \sqrt{\frac{p_1 p_2}{2\gamma}} = \sqrt{q_1 q_2}$ and (4.5) $1/\mu \leq q_1 \leq q_2 \leq \mu$ we get

$$1/\mu \leq q_1 \leq \chi = \sqrt{q_1 q_2} \leq q_2 \leq \mu \quad (4.7)$$

We already know that at $\zeta = 1/\mu$, ρ_{RR} is a decreasing function of q_1 and that at $\zeta = \mu$, ρ_{RR} is an increasing function of q_1 . (4.7) shows that at $\zeta = \chi$, ρ_{RR} is an increasing function of q_1 since $q_1 \leq \chi$. If we suppose that $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \chi) \geq \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu^{-1})$ then we always can decrease q_1 (or p_1) such that it improves the convergence factor (by reducing the values both at $\zeta = \chi$ and at $\zeta = \mu$). Playing with q_2 we can similarly prove that $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \chi) \leq \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu)$.

Note that this also demonstrates that $\zeta_1 \geq 1/\mu$ and $\zeta_3 \leq \mu$.

This is sufficient to fully describe the behaviour of the convergence factor with respect to q_1 , q_2 and ζ , as shown in figure 4.1. In practice, the two cases will be differentiated by the sign of the second order derivate of $\rho_{RR}(p_1, p_2, \zeta)$ at $\zeta = \chi$.

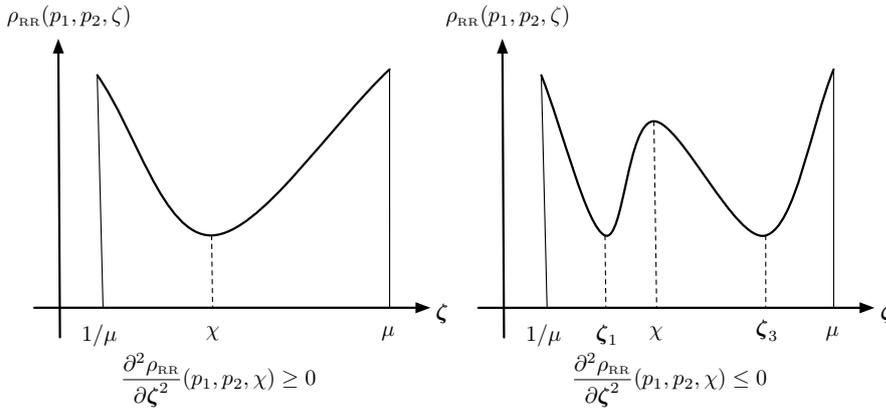


FIG. 4.1. Behaviour of the convergence factor with respect to ζ

The following proves that the values taken by $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \zeta)$ at the two end points $\zeta = 1/\mu$, $\zeta = \mu$ are equal.

Indeed if we consider $\rho_{RR}(p_1, p_2, 1/\mu) < \rho_{RR}(p_1, p_2, \mu)$ (resp. $\rho_{RR}(p_1, p_2, 1/\mu) > \rho_{RR}(p_1, p_2, \mu)$), it is always possible to decrease the maximum value of $\rho_{RR}(\zeta)$ by increasing (resp. decreasing) the values of p_1 (resp. p_2). Thus the optimal parameters must satisfy $\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu^{-1}) = \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \mu)$: the equioscillation property.

This holds for

$$(p_1 + p_2)(2\gamma - p_1 p_2)S(p_1, p_2, \mu, \gamma) = 0 \quad (4.8)$$

with

$$S(p_1, p_2, \mu, \gamma) = 2 \left[(1 + \gamma^2) - \gamma(\mu + \mu^{-1})^2 \right] p_1 p_2 + (\gamma - 1)(\mu + 1/\mu)(p_1 - p_2)(2\gamma + p_1 p_2) + 2\gamma(p_1 - p_2)^2 - (2\gamma - p_1 p_2)^2 \quad (4.9)$$

Obviously all couple p_1, p_2 that satisfies the relation $p_1 p_2 = 2\gamma$ are solutions to (4.8). We are now going to show that there are no other admissible values. Other potential

solutions of the problem are the solutions of $S(p_1, p_2, \mu) = 0$. S can be seen as a second order polynomial in p_2 and thus have two real solutions:

$$p_2 = f_1(p_1) \quad p_2 = f_2(p_1) \quad (4.10)$$

If we assume that p_2 is related to p_1 with one of the relations (4.10), looking at the figure 4.1 we can argue that for any couple (p_1, p_2) we must have $dp_2/dp_1 < 0$ to satisfy an equioscillation property. Indeed let $\rho_{RR}^\dagger(p_1, \zeta)$ be defined by

$$\rho_{RR}^\dagger(p_1, \zeta) = \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), \zeta)$$

Then

$$\frac{\partial \rho_{RR}^\dagger(p_1, \zeta)}{\partial p_1} = \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), \zeta)}{\partial p_1} + \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), \zeta)}{\partial p_2} \frac{dp_2}{dp_1} \quad (4.11)$$

We have already proved that the following properties must hold

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_1} &> 0, \quad \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_2} > 0 \\ \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), \mu)}{\partial p_1} &< 0, \quad \frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), \mu)}{\partial p_2} < 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

If we suppose $dp_2/dp_1 > 0$ then (4.11) and (4.12) show that $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ is an increasing function of p_1 while $\rho_{RR}^\dagger(p_1, \mu)$ is a decreasing function of p_1 , thus (4.12) and the equioscillation property cannot be satisfied at the same time if $dp_2/dp_1 > 0$.

It can be shown that the two solutions given by (4.10) do not verify this last condition. Indeed one can prove that we have $df_1/dp_1 > 0$ and $df_2/dp_1 > 0$. Details of the computations are omitted here but we mention that the only conditions necessary to find this result are $\gamma > 0, \mu > 1$.

We can conclude that $p_1 p_2 = 2\gamma$ is the only solution which leads to an equioscillation property. ■

Let us mentioned that this implies that $\chi = \sqrt{\frac{p_1 p_2}{2\gamma}} = 1$ and that

$$\rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, \zeta) = \rho_{RR}(p_1^*, p_2^*, 1/\zeta) \quad \forall \zeta \in [1/\mu, \mu]$$

4.4. Solution of the minmax problem. The convergence factor is now a function of p_1 and ζ only:

$$\rho_{RR}^\dagger(p_1, \zeta) = \rho_{RR}(p_1, 2\gamma/p_1, \zeta)$$

LEMMA 4.3. *The solution of the minmax problem is given by the solution of the minimization of $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu)$. The minimization must be done under the constraint that $p_1^* \geq p_1^{*, \text{equi}}$ where $p_1^{*, \text{equi}}$ is the solution of the three points equioscillation problem $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1) = \rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu) = \rho_{RR}^\dagger(p_1, \mu)$*

Figure 4.1 ables us to remark that the resolution of the minmax problem corresponds to the minimization of $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ (or $\rho_{RR}^\dagger(p_1, \mu)$) with respect to p_1 . If we are in the case where $\chi = 1$ is a local maximum, the additional constraint given by theorem (4.2) must be imposed

$$\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1) \leq \rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu) \quad (4.13)$$

Knowing that $p_1 p_2 = 2\gamma$ or equivalently $q_1 q_2 = 1$, the range of admissible values given by (4.5) can now be written $1/\mu \leq q_1 \leq 1$ and translates in terms of the variable p_1 :

$$p_1 \in [p_{1,\min}, p_{1,\max}] \text{ where } p_{1,\min} = (1 - \gamma + \sqrt{1 + \gamma^2})/\mu, \quad p_{1,\max} = (1 - \gamma + \sqrt{1 + \gamma^2}) \quad (4.14)$$

Moreover it can be shown that $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1)$ is a decreasing function of p_1 . So that the constraint (4.13) can also be written $p_1^* \geq p_1^{*,\text{equi}}$ where $p_1^{*,\text{equi}}$ is the solution of a three points equioscillation problem $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1^{*,\text{equi}}, 1) = \rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1^{*,\text{equi}}, 1/\mu) (= \rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1^{*,\text{equi}}, \mu))$.

We are now looking at the minimization of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ for $p_1 \in [p_{1,\min}, p_{1,\max}]$.

LEMMA 4.4. *For $\gamma > 1$, the derivative of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ has exactly one root in the range $[p_{1,\min}, p_{1,\max}]$. This root corresponds to a local minimum of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$. In the special case $\gamma = 1$, $p_1 = p_{1,\max} (= \sqrt{2})$ is always a root of $\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial p_1}(p_1, 1/\mu)$.*

The derivative of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ can be written under the following form:

$$\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial p_1}(p_1, 1/\mu) = g(p_1, \mu)N(p_1, \mu)$$

where g is a strictly positive function and $N(p_1, \mu)$ a six order polynomial in p_1 . The change of variable $v = 2\gamma/p_1 - p_1$ transforms $N(p_1, \mu)$ in

$$N(p_1, \mu) = p_1^3 Q(v)$$

where $Q(v)$ is the third order polynomial given by

$$Q(v) = 8(\gamma - 1)(1 + \gamma^2) + 2\beta(\gamma\beta^2 - 3(1 + \gamma^2))v + 2(\gamma - 1)\beta^2 v^2 - \beta v^3 \quad (4.15)$$

where $\beta = 1/\mu + \mu$.

It can be shown that, for $\gamma > 1$, this polynomial has only one root in $[v_{\min}, v_{\max}]$ where, according to (4.14), v_{\min} and v_{\max} are given by

$$v_{\min} = 2(\gamma - 1), \quad v_{\max} = (\gamma - 1)\beta + \sqrt{1 + \gamma^2}\sqrt{\beta^2 - 4} \quad (4.16)$$

This root corresponds to a minimum of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ since it can be found that $\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial p_1}(p_{1,\min}, 1/\mu) \leq 0$ and $\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial p_1}(p_{1,\max}, 1/\mu) \geq 0$.

For $\gamma = 1$, $v = v_{\min} = 0$ (i.e. $p_1 = p_{1,\max} = \sqrt{2}$) is always a root of $Q(v)$.

Figure 4.2 exhibits the variations of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ with p_1 . p_1^{\min} is the location of the minimum of $\rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ over $[p_{1,\min}, p_{1,\max}]$.

The solution of the constrained minimization problem is now easily handled: if $p_1^{\min} \leq p_1^{*,\text{equi}}$ the solution of the minmax problem is given by $p_1^{*,\text{equi}}$, otherwise the solution of the minmax problem is given by p_1^{\min} .

The inequality $p_1^{\min} \leq p_1^{*,\text{equi}}$ is satisfied if and only if $\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial p_1}(p_1^{*,\text{equi}}, \mu) \geq 0$ or equivalently $Q(v^{*,\text{equi}}) \geq 0$ (where $v^{*,\text{equi}} = 2\gamma/p_1^{*,\text{equi}} - p_1^{*,\text{equi}}$).

Finally the following result will be useful: for $v \geq v_{\max}$ or equivalently $p_1 \leq p_{1,\min}$ we have $Q(v) \leq 0$ (or $\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)}{\partial p_1} \leq 0$). Indeed using relation (4.11) at $\zeta = 1/\mu$:

$$\frac{\partial \rho_{\text{RR}}^\dagger(p_1, 1/\mu)}{\partial p_1} = \frac{\partial \rho_{\text{RR}}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_1} + \frac{\partial \rho_{\text{RR}}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_2} \frac{dp_2}{dp_1}$$

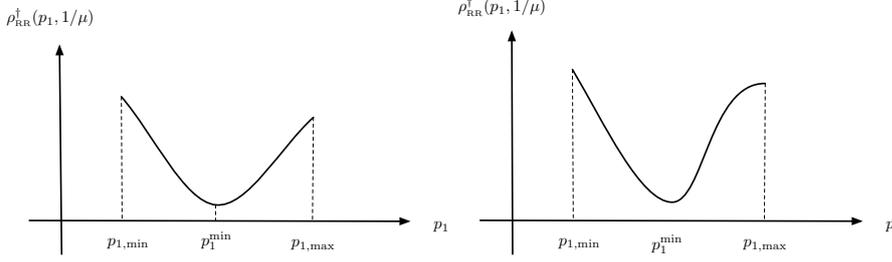


FIG. 4.2. Behaviour of $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu)$ with respect to p_1 . The general case ($\gamma > 1$) is on the left and the special case $\gamma = 1$ on the right

If $p_1 \leq p_{1,\min}$, $\frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_1} < 0$, but through the relation $p_2 = 2\gamma/p_1$, we have $p_2 \geq p_{2,\max} \left(= (\gamma - 1 + \sqrt{1 + \gamma^2}) \mu \right)$ so that $\frac{\partial \rho_{RR}(p_1, p_2(p_1), 1/\mu)}{\partial p_2} \geq 0$. Using $\frac{dp_2}{dp_1} = -2\gamma/p_1^2 \leq 0$, this proves that $\frac{\partial \rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu)}{\partial p_1} \leq 0$.

We are now left with the problem of finding the solution of the three point equioscillation problem.

THEOREM 4.5 (Equioscillation between 3 points). *The only parameters $p_1^{*,\text{equi}}$ and $p_2^{*,\text{equi}}$, such that $p_1^{*,\text{equi}} \leq p_{1,\max}$, that satisfy an equioscillation of the convergence factor ρ_{RR} between the three points $(1/\mu, 1, \mu)$ are*

$$\begin{cases} p_1^{*,\text{equi}} = \frac{1}{2} \left[-v^{*,\text{equi}} + \sqrt{8\gamma + (v^*)^2} \right] \\ p_2^{*,\text{equi}} = 2\gamma \left(p_1^{*,\text{equi}} \right)^{-1} \end{cases}$$

where

$$v^{*,\text{equi}} = \frac{1}{2} \left[(2 + \beta)(\gamma - 1) + \sqrt{4(1 + \gamma)^2(\beta - 1) + \beta^2(\gamma - 1)^2} \right] \quad (4.17)$$

Proof: We have to find the solution of the problem $\rho_{RR}^\dagger(p_1, 1/\mu) = \rho_{RR}^\dagger(p_1, 1)$. It can be shown that this is equivalent to the search of the zeros of a fourth order polynomial $R(p_1)$ that can be written under the form

$$R(p_1) = p_1^2 T(v), \quad T(v) = 2(1 + \gamma^2) - 4\gamma\beta + (1 - \gamma)(2 + \beta)v + v^2$$

where v is again defined by $v = 2\gamma/p_1 - p_1$.

The unique root of $T(v)$ that satisfies $v \geq v_{\min}$ (i.e. $p_1 \leq p_{1,\max}$) is given by

$$v^{*,\text{equi}} = \frac{1}{2} \left[(2 + \beta)(\gamma - 1) + \sqrt{4(1 + \gamma)^2(\beta - 1) + \beta^2(\gamma - 1)^2} \right]$$

and $p_1^{*,\text{equi}}$ is deduced from the relation between p_1 and v . ■

Putting everything together the solution of the minmax problem is given by

THEOREM 4.6. *The optimal parameters of the minmax problem are given by*

$$\begin{cases} p_1^* = \frac{1}{2} \left[-v^* + \sqrt{8\gamma + (v^*)^2} \right] \\ p_2^* = 2\gamma/p_1^* = p_1^* + v^* \end{cases}$$

where

$$v^* = \begin{cases} v^{*,\text{equi}} & \text{if } Q(v^{*,\text{equi}}) \geq 0 \\ v^{*,\text{mini}} & \text{else} \end{cases}$$

and $v^{*,\text{equi}}$ is given by (4.17). $v^{*,\text{mini}}$ is the unique solution of $Q(v) = 0$ over $[v_{\min}, v_{\max}]$.

Proof: All the proof ingredients have been given before. Note that $v^{*,\text{equi}}$ might be superior to v_{\max} . But since we have proved that $Q(v \geq v_{\max}) \leq 0$, this case does not have to be explicitly considered.

Note that this additional result can also be shown :

$$Q(v^{*,\text{equi}}) \geq 0 \Leftrightarrow \beta \geq 1 + \sqrt{5} \text{ or } (\beta^0 < \beta < 1 + \sqrt{5} \text{ and } \gamma \geq f(\beta))$$

where β^0 is the root of the fourth order polynomial $16 - 16X - 4X^2 + X^4$ which approximate value is given by $\beta^0 \approx 2.77294$ and the fonction f is given by

$$f(\beta) = \frac{(\beta - 2)^3 \beta (\beta + 2) + (4 + 2\beta - \beta^2) \sqrt{-16 + 48\beta - 44\beta^2 + 12\beta^3 + 3\beta^4 - 4\beta^5 + \beta^6}}{16 - 16\beta - 4\beta^2 + \beta^4}$$

$f(\beta)$ for $\beta^0 < \beta < 1 + \sqrt{5}$ is plotted on figure 4.3. We can remark that $f(\beta) \geq 1, \forall \beta$ so that the condition $\gamma \geq f(\beta)$ is always false for $\gamma = 1$ (continuous case).

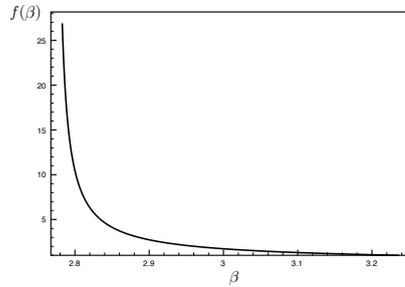


FIG. 4.3. *Switch from a 2 points to a 3 points equioscillations for $\beta^0 < \beta < 1 + \sqrt{5}$. The 3 points equioscillation occurs when $\gamma \geq f(\beta)$.*

It is also interesting to know if $\chi = \sqrt{\frac{p_1 p_2}{2\gamma}} = 1$ is either a local minimum or a local maximum of the optimized convergence factor by looking at the sign of $\frac{\partial^2 \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial \chi^2}(p_1, \chi)$. It can be proved that in terms of the variable $v = 2\gamma/p_1 - p_1$, the inequality $\frac{\partial^2 \rho_{\text{RR}}^\dagger}{\partial \chi^2}(p_1, \chi) > 0$ can be written:

$$v \geq v_0, \quad \text{where } v_0 = 2(\gamma - 1) + \sqrt{2(1 + \gamma^2)}$$

We deduce that $\zeta = \chi = 1$ is a local minimum only if $v^{*,\text{mini}} \leq v_0$. This can be checked by evaluating the polynomial $Q(v)$ in $v = v_0$ and looking at the sign of the result: if $Q(v_0) \leq 0$ then $v^{*,\text{mini}} \leq v_0$ and we have a local minimum at $\zeta = \chi = 1$. It can be found that

$$Q(v_0) < 0 \Leftrightarrow 2 < \beta < \beta_0 \quad \text{or} \quad \left(\beta_0 \leq \beta \leq 2\sqrt{2} \text{ and } \gamma < g(\beta) \right)$$

where $\beta_0 = \frac{8 + 5\sqrt{2}}{2(3 + 2\sqrt{2})} + \frac{\sqrt{90 + 64\sqrt{2}}}{2(3 + 2\sqrt{2})} \approx 2.44547$. The analytical expression of $g(\beta)$ is complicated and is not given here. Note that $g(\beta) \geq 1, \forall \beta$ so that, for the special case $\gamma = 1$, $Q(v_0) < 0$ is equivalent to $2 < \beta \leq 2\sqrt{2}$.

Figure 4.4 summarizes the three different domains: 3 points equioscillation, 2 points equioscillation with χ as a local maximum and 2 points equioscillation with χ as a local minimum.

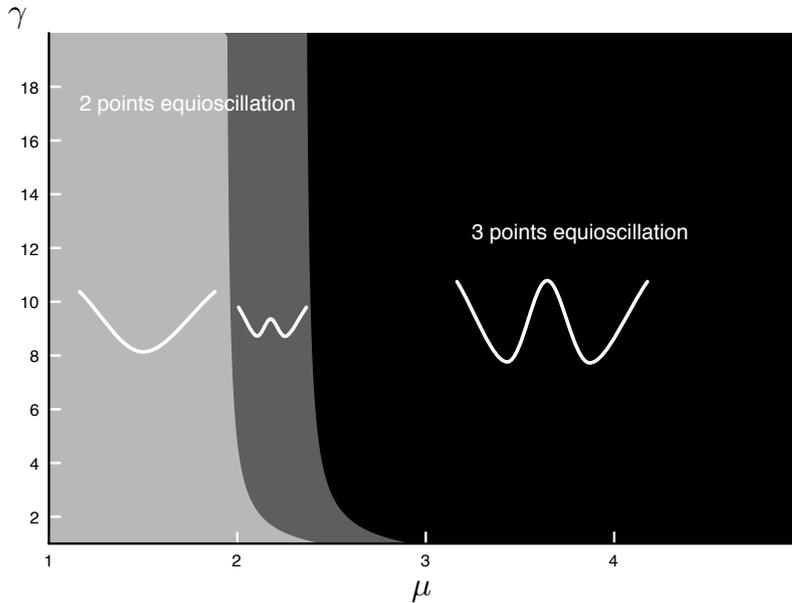


FIG. 4.4. The three different domains of three points equioscillation (black), two points equioscillation with χ being a local maximum (dark grey) and two points equioscillation with χ being a local minimum (light grey)

The resulting optimized convergence factor is shown in figure 4.5 with respect to μ and γ .

We can draw the usual remarks about the convergence properties of the Schwarz algorithms : the convergence speed increases when the discontinuities of the coefficients (γ) is increased and the convergence speed decreases when μ , an increasing function of the ratio $\frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}$, is increased.

In figures 4.6, 4.7 we compare, for $\mu = 2$ and $\mu = 6$, the results found in the two-sided case with the one of the section 3 for the *Robin-Neumann* transmission conditions.

The *Robin-Robin* approach is highly more efficient than the *Robin-Neumann* approach when γ is closed to one. When γ is increased, the two approaches tends towards a *Dirichlet-Neumann* operator.

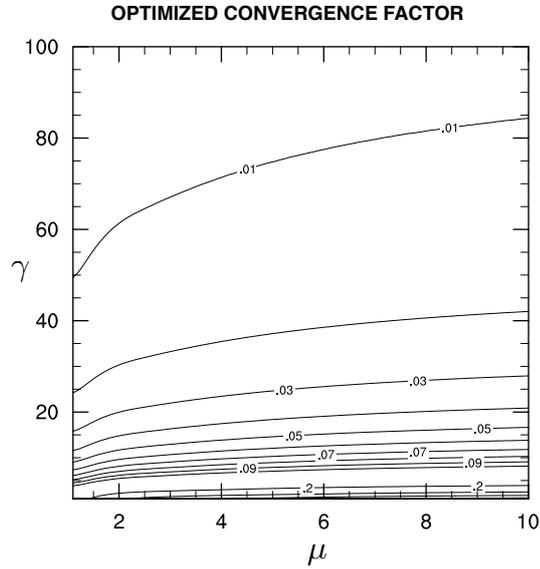


FIG. 4.5. Optimized convergence factor with respect to μ and γ ($1 \leq \mu \leq 10, 1 \leq \gamma \leq 100$)

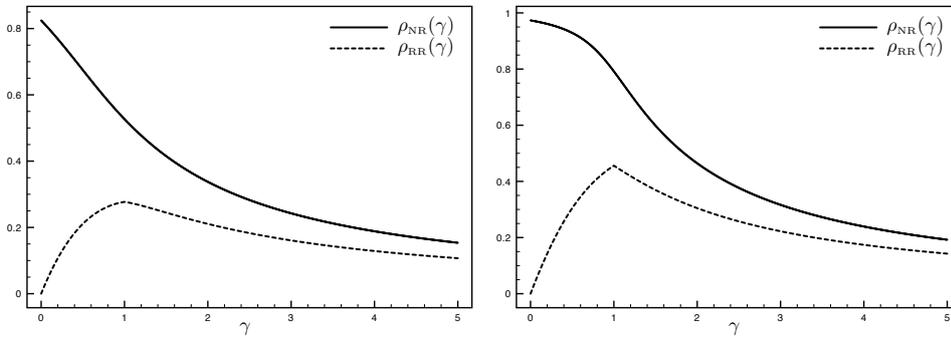


FIG. 4.6. Optimized convergence factors for Neumann-Robin and Robin-Robin boundary conditions. $\mu = 2$ (left) and $\mu = 6$ (right)

4.5. The continuous case. THEOREM 4.7 (Continuous case). Under the assumptions $D_1 = D_2 = D$, the optimal parameters p_1^* and p_2^* are given by

$$\begin{cases} p_1^* = \frac{1}{2} \left[-v^* + \sqrt{8 + (v^*)^2} \right] \\ p_2^* = 2/p_1^* = p_1^* + v^* \end{cases}$$

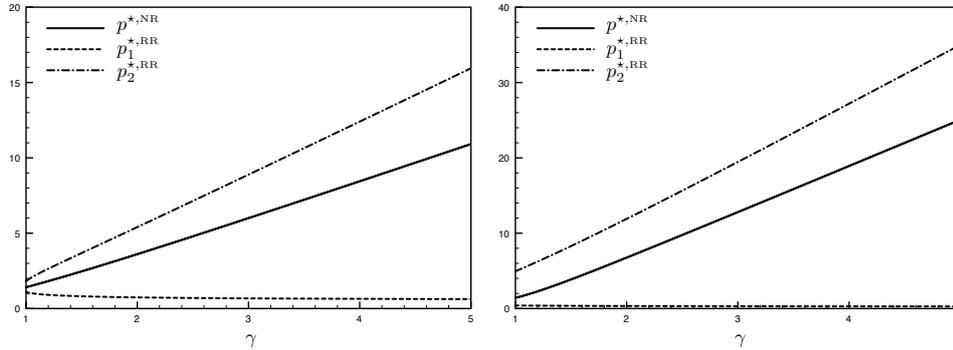


FIG. 4.7. Optimized parameters for Neumann-Robin and Robin-Robin boundary conditions. $\mu = 2$ (left) and $\mu = 6$ (right)

where

$$v^* = \begin{cases} 2\sqrt{\beta-1} & \text{if } \beta \geq 1 + \sqrt{5} \\ \sqrt{2\beta^2 - 12} & \text{if } \sqrt{6} \leq \beta < 1 + \sqrt{5} \\ 0 & \text{if } 2 < \beta < \sqrt{6} \end{cases}$$

Proof: We use the theorem (4.6) which gives the optimal conditions in the general case.

As already mentioned the condition $Q(v^{*,\text{equi}}) \geq 0$ reduces for $\gamma = 1$ to $\beta \geq 1 + \sqrt{5}$. In that case, the solution of the minmax problem is given by $v^* = v^{*,\text{equi}} = 2\sqrt{\beta-1}$. If $\beta < 1 + \sqrt{5}$, we have to compute $v^{*,\text{min}}$ the value that cancels $Q(v)$ over $[v_{\min}, v_{\max}]$ where $v_{\min} = 0$, $v_{\max} = 2\sqrt{\beta^2 - 4}$.

For $\gamma = 1$, the expression (4.15) of the polynomial $Q(v)$ is

$$Q(v) = -\beta v (v^2 - (2\beta^2 - 12))$$

We find that

$$v^{*,\text{min}} = \begin{cases} \sqrt{2\beta^2 - 12} & \text{if } \beta \geq \sqrt{6} \\ 0 & \text{if } 2 < \beta \leq \sqrt{6} \end{cases}$$

Note that when $\beta \leq \sqrt{6}$, $v^* = 0$ which gives $p_1^* = p_2^* = \sqrt{2}$, which corresponds to the zeroth-order *one-sided* optimal parameters found in [6].

Conclusion. We obtained new results for an optimized Schwarz method for non-overlapping diffusion problems with discontinuous coefficients. This method uses zeroth order two-sided Robin transmission conditions i.e. we considered two different Robin conditions on both sides of the interface. We based our approach on a model problem with two subdomains, we proved the convergence of the corresponding algorithm and we analytically studied the behaviour of the convergence factor with respect to the parameters of the problem. We showed that the optimized convergence factor satisfies an equioscillation property between two or three points depending on the configurations. In comparison with other methods like the Dirichlet-Robin approach,

these two-sided Robin-Robin conditions are specially superior when the ratio between discontinuous coefficients is closed to one.

REFERENCES

- [1] D. BENNEQUIN, M. J. GANDER AND L. HALPERN, *A homographic best approximation problem with application to optimized Schwarz waveform relaxation*, to appear in Mathematics of Computation, 2008
- [2] E. BLAYO, L. HALPERN AND C. JAPHET, *Optimized schwarz waveform relaxation algorithms with nonconforming time discretization for coupling convection-diffusion problems with discontinuous coefficients*, Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI; Series: Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 55, 2007.
- [3] G. DANABASOGLU, W. G. LARGE, J. TRIBBIA, P. GENT, B. BRIEGLEB AND J. C. MCWILLIAMS, *Diurnal coupling in the tropical oceans of ccsm3*, Journal of climate, Vol. 19, 2006
- [4] O. DUBOIS, *Optimized schwarz methods for the advection-diffusion equation and for problems with discontinuous coefficients*, Ph.D. thesis, McGill University, 2007.
- [5] M. J. GANDER AND A. M. STUART, *Space-Time Continuous Analysis of Waveform Relaxation for the Heat Equation*, SIAM Journal on Scientific Computing, 19:2014-2031, 1998.
- [6] M. J. GANDER AND L. HALPERN, *Methodes de relaxation d'ondes pour l'equation de la chaleur en dimension 1*, C. R. Acad. Sci. Paris t. 336, Série I, pages 519-524, 2003.
- [7] L. HALPERN M. J. GANDER AND M. KERN, *A schwarz waveform relaxation method for advection-diffusion-reaction problems with discontinuous coefficients and non-matching grids*, Proceedings of the 16th International Conference on Domain Decomposition Methods, 2005.
- [8] M. J. GANDER AND L. HALPERN, *Optimized schwarz waveform relaxation for advection reaction diffusion problems*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 45(2):666-697, 2007.
- [9] M. J. GANDER AND L. HALPERN, AND F. MAGOULES, *An Optimized Schwarz Method with Two-Sided Robin Transmission Conditions for the Helmholtz Equation*, Int. J. for Num. Meth. in Fluids, Vol. 55, No. 2, pp. 163-175, 2007.
- [10] M. J. GANDER, L. HALPERN AND F. NATAF, *Optimized Schwarz methods*, in T. Chan, T. Kako, H. Karawada, and O. Pironneay, editors, Twelfth International Conference on Domain Decomposition Methods, Chiba, Japan, pages 15-28, Bergen, 2001. Domain Decomposition Press.
- [11] E. LELARASMEE, A. RUEHLI AND A. SANGIOVANNI-VINCENTELLI, *The waveform relaxation method for time-domain analysis of large scale integrated circuits*, IEEE Trans. on CAD of IC and Syst., vol 1, pp 131-145, 1982
- [12] F. LEMARIÉ, L. DEBREU AND E. BLAYO, *Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients, Part 2 : the variable coefficients case*, submitted to SIAM Journal on Scientific Computing, 2008
- [13] P. L. LIONS, *On the schwarz alternating method iii: a variant for nonoverlapping subdomains*, in Tony F. Chan, Roland Glowinski, Jacques Piaux, et Olof Widlund, Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, held in Houston, Texas, March 20-22, 1990.
- [14] Y. MADAY AND F. MAGOULÉS, *Non-overlapping additive Schwarz methods tuned to highly heterogeneous media*, Comptes Rendus de l'Academie des Sciences. Serie 1, Mathematique 341-11, pp 701-705, 2005.
- [15] O. S. MADSEN, *A realistic model of the wind-induced Ekman boundary layer*, J. Phys. Oceanogr., 7, 248-255, 1977
- [16] C. JAPHET AND F. NATAF, *The best interface conditions for domain decomposition methods : Absorbing boundary conditions*, Artificial boundary conditions, with Applications to Computational Fluid Dynamics Problems, L. Tourrette eds, 2000.

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

3.7 Etude de convergence avec des sous-domaines de dimension finie

Comme nous l'avons mentionné dans les sections précédentes, afin de démontrer et d'optimiser la convergence de l'algorithme de Schwarz on considère généralement que les sous-domaines en présence sont de taille infinie ($L_1, L_2 \rightarrow \infty$). Ceci revient donc à dire que l'erreur tend vers zéro à l'infini. Cependant lorsque l'on traite des problèmes en domaine borné le facteur de convergence que l'on souhaitera optimiser est en théorie différent. La question à laquelle nous essayons de répondre est : quelle est l'influence de la taille des sous-domaines sur les valeurs optimales des paramètres de Robin présents dans les conditions d'interface ? Nous souhaitons ici répondre à cette question afin de proposer un critère pour lequel les formules analytiques des paramètres de Robin optimaux trouvées précédemment (avec des sous-domaines infinis) sont valides.

3.7.1 Symboles optimaux en domaine borné

Nous allons ici considérer deux cas : un premier correspondant à des conditions de type Dirichlet aux limites extérieures des sous-domaines et un second avec des conditions de type Neumann. Nous définissons $\lambda_j^{\text{opt,dd}}$ (resp. $\lambda_j^{\text{opt,nn}}$) les symboles optimaux correspondants. Sans entrer dans le détail des calculs, en procédant à une analyse de Fourier sur le problème avec des domaines bornés, nous pouvons établir les relations suivantes

$$\lambda_1^{\text{opt,dd}} = \lambda_1^{\text{opt},\infty} \coth \sqrt{i(F_2(\omega))^{-1}} \quad \lambda_2^{\text{opt,dd}} = \lambda_2^{\text{opt},\infty} \coth \sqrt{i(F_1(\omega))^{-1}} \quad (3.9)$$

dans le cas Dirichlet et

$$\lambda_1^{\text{opt,nn}} = \frac{\lambda_1^{\text{opt},\infty}}{\coth \sqrt{i(F_2(\omega))^{-1}}} \quad \lambda_2^{\text{opt,nn}} = \frac{\lambda_2^{\text{opt},\infty}}{\coth \sqrt{i(F_1(\omega))^{-1}}} \quad (3.10)$$

dans le cas Neumann. Les termes $\lambda_j^{\text{opt},\infty}$ sont les symboles obtenus en considérant des domaines de taille infinie (équation (2.15), ce chapitre). Les termes $F_j(\omega)$ sont définis par $F_j(\omega) = \frac{D_j}{L_j^2 \omega}$. Ceux-ci sont sans dimension et peuvent être identifiés au nombre de Fourier $\frac{D_j T}{L_j^2}$ qui est utilisé pour caractériser la conduction de la chaleur. Cependant notons que dans notre définition cette quantité est une fonction de ω , au lieu de T l'échelle de temps

3.7 Etude de convergence avec des sous-domaines de dimension finie

caractéristique dans la définition classique. Le but est ici de déterminer, grâce aux relations (3.9) et (3.10), si le fait de considérer des sous-domaines de taille finie modifie de manière significative les symboles optimaux. Pour ce faire nous pouvons comparer $\lambda_j^{\text{opt},dd}$, $\lambda_j^{\text{opt},nn}$ et $\lambda_j^{\text{opt},\infty}$, ce qui revient à étudier la quantité $\coth \sqrt{i(\text{Fo}_j(\omega))^{-1}}$.

En considérant $\omega > 0$ nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\Re(\lambda_1^{\text{opt},dd})}{\Re(\lambda_1^{\text{opt},\infty})} &= \frac{\sinh\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right) + \sin\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right)}{\cosh\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right) - \cos\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right)} \\ \frac{\Im(\lambda_1^{\text{opt},dd})}{\Im(\lambda_1^{\text{opt},\infty})} &= \frac{\sinh\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right) - \sin\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right)}{\cosh\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right) - \cos\left(\sqrt{2}\text{Fo}_j^{-1/2}(\omega)\right)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Il nous faut maintenant étudier ces expressions afin de trouver les valeurs du nombre de Fourier (si elles existent) pour lesquelles ces termes diffèrent significativement de 1. En effet, comme le couple (λ_1, λ_2) qui annule le facteur de convergence est unique, les valeurs $\lambda_j^{\text{opt},dd}$ et $\lambda_j^{\text{opt},\infty}$ doivent être proches pour valider l'hypothèse de départ. Sur la figure 3.2, l'évolution des quantités (3.11) en fonction des nombres de Fourier est représentée. Lorsque ces quantités sont proches de 1, le fait de considérer des sous-domaines de dimension finie n'influe pas sur la vitesse de convergence de l'algorithme. Nous remarquons qu'il est possible de déterminer empiriquement une valeur critique du nombre de Fourier ($\text{Fo}_c \approx 0.02$). En dessous de cette valeur critique, nous pouvons considérer que $\lambda_j^{\text{opt},dd} = \lambda_j^{\text{opt},nn} = \lambda_j^{\text{opt},\infty}$ car l'écart maximum entre ces termes est de l'ordre de 0.003%. Au-dessus de cette valeur, les symboles optimaux diffèrent de manière significative. Par exemple pour $\text{Fo} = 0.5$, (resp. $\text{Fo} = 2$) l'erreur commise est de l'ordre de 30% (resp. 100%). Cela signifie que la quantité sans dimension $\text{Fo}_j(\omega) = \frac{D_j}{L_j^2 \omega}$ doit être "assez petite" pour pouvoir valider l'hypothèse "domaines infinis". Pour des applications avec des sous-domaines minces et de longues intégrations en temps, ceci peut n'est pas nécessairement le cas.

Notons que dans le cas à coefficients continus $D_1 = D_2 = D$, nous avons

$$|\rho_{dd}^\dagger|_{cont} = |\rho_{nn}^\dagger|_{cont} = \exp\left(-\sqrt{2}(F o_1^{-1} + F o_2^{-1})\right) \quad (3.12)$$

qui est toujours plus petit que 1, ce qui signifie que l'algorithme demeure convergent en toutes circonstances.

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

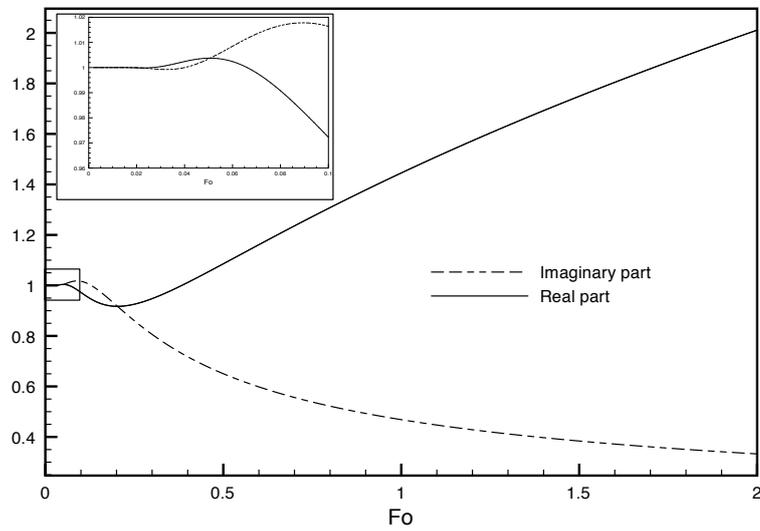


Fig. 3.2: Evolution des rapports donnés dans (3.11), entre les parties réelles et imaginaires des symboles optimaux $\lambda_j^{\text{opt,dd}}$ et $\lambda_j^{\text{opt,\infty}}$ en fonction du nombre de Fourier. Une "valeur critique" semble être $Fo_c \approx 0.02$.

3.8 Optimisation par méthode de contrôle optimal

Nous avons trouvé jusqu'à maintenant une quantité utile pour savoir si le fait de considérer des domaines non-bornés constitue, ou non, une hypothèse forte. Cette étude a été menée dans l'espace de Fourier. Cependant il serait intéressant d'évaluer l'impact de l'hypothèse sur les paramètres de Robin optimisés (dans le cadre d'une approximation d'ordre 0 des conditions absorbantes) solutions du problème de min-max traité dans ce chapitre.

Nous proposons de faire cette évaluation numériquement. Pour ce faire nous choisissons $D_1 = 10^{-2}m^2.s^{-1}$, $D_2 = 1m^2.s^{-1}$ (correspondants approximativement aux valeurs maximales de diffusion que l'on peut observer dans les couches limites turbulentes de l'atmosphère et de l'océan), $L_1 = L_2 = 100m$ et $\omega_{max} = 10^{-1}s^{-1}$. Pour deux gammes de fréquences temporelles (i.e. pour deux gammes de nombres de Fourier $F_j(\omega)$) nous nous intéressons au comportement des termes $\rho_\infty(p_1^*, p_2^*)$, $\rho_{dd}(p_1^*, p_2^*)$ et $\rho_{nn}(p_1^*, p_2^*)$ en fonction de ω . Les résultats, représentés sur la figure 3.3, sont en accord avec notre étude analytique. En effet, pour des basses fréquences nous remarquons que les trois fonctions ne correspondent plus et qu'il y a une transition entre une région où $\rho_{nn}(p_1^*, p_2^*)$ est meilleur que $\rho_{dd}(p_1^*, p_2^*)$ et $\rho_\infty(p_1^*, p_2^*)$ vers une région où $\rho_{nn}(p_1^*, p_2^*)$ devient significativement moins bon.

Ces résultats montrent que l'hypothèse "domaines infinis" doit être considérée avec précautions dans les situations où des basses fréquences sont présentes, ou dans les configurations où la géométrie des sous-domaines et les coefficients de diffusion fournissent une grande valeur de $\frac{D_j}{\omega L_j^2}$. Pour des applications dans le cadre océan-atmosphère, ceci n'est a priori pas problématique (sauf si l'on considère des phénomènes de type circulation thermohaline à échelles de temps très longues), car les sous-domaines sont de grande taille et les coefficients de diffusion sont relativement faibles, mais cela peut le devenir pour d'autres types d'applications.

3.8 Optimisation par méthode de contrôle optimal

Dans ce chapitre nous avons procédé à l'optimisation de la vitesse de convergence des algorithmes de Schwarz en nous basant sur une approche continue du problème. De plus cette étude au niveau continu faisait appel à un certain nombre d'hypothèses comme le fait de considérer des sous-domaines de taille infinie ($L_1, L_2 \rightarrow \infty$). Une hypothèse supplémentaire était également faite au niveau du problème de minmax car l'optimisation était effectuée

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

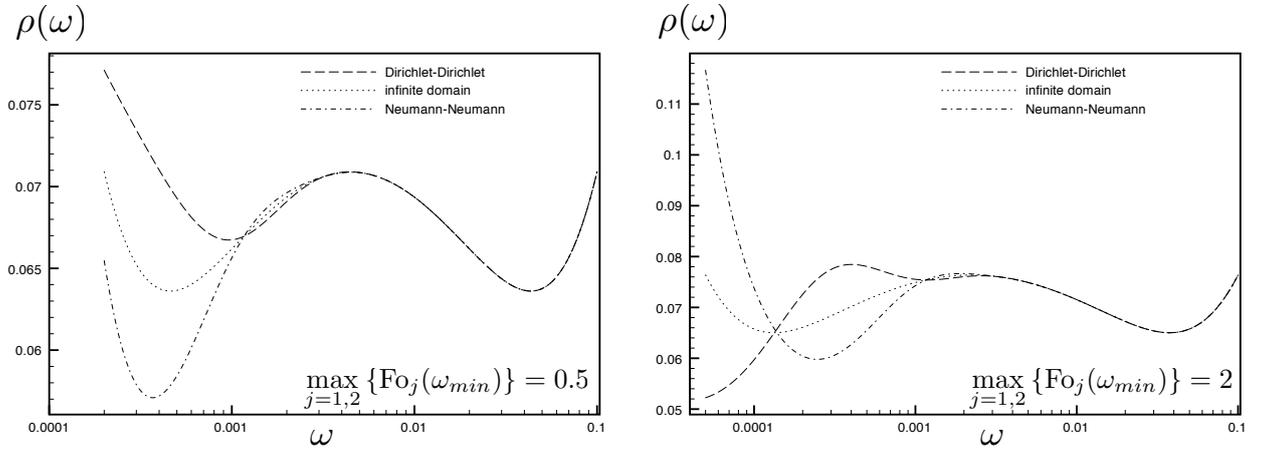


Fig. 3.3: Variations de $\rho_\infty(p_1^*, p_2^*)$, $\rho_{dd}(p_1^*, p_2^*)$ et $\rho_{nn}(p_1^*, p_2^*)$ en fonction de ω avec $\omega_{max} = 10^{-1} s^{-1}$, $D_1 = 10^{-2} m^2 \cdot s^{-1}$, $D_2 = 1 m^2 \cdot s^{-1}$ et $L_1 = L_2 = 100 m$. La valeur de ω_{min} est choisie pour avoir $Fo_2(\omega_{min}) = 0.5$ (à gauche) et $Fo_2(\omega_{min}) = 2$ (à droite). Pour $Fo_2(\omega_{min}) = 0.02$ (non représentés) les trois facteurs de convergence sont rigoureusement les mêmes.

3.8 Optimisation par méthode de contrôle optimal

sur une gamme de fréquences "théoriques" $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ qu'il n'est pas certain de retrouver en pratique dans la simulation. En ce sens nous avons souhaité vérifier s'il y a une différence significative entre les paramètres optimaux déterminés analytiquement sur un problème continu et les paramètres optimaux propres au code de calcul au niveau discret pour un cas donné. Pour ce faire nous avons placé l'algorithme de Schwarz dans le contexte d'un problème de contrôle optimal ; ce travail a été effectué lors de l'encadrement d'un stage de master recherche (Pelen, 2008). L'objectif de l'algorithme de Schwarz est d'assurer, de la manière la plus rapide possible, la consistance requise à l'interface, i.e. $u_1(0, t) = u_2(0, t)$ et $D_1 \frac{\partial u_1}{\partial z}(0, t) = D_2 \frac{\partial u_2}{\partial z}(0, t)$. Les paramètres optimaux au niveau discret peuvent être obtenus en minimisant une fonction coût

$$\begin{aligned} J(p_1, p_2) &= \frac{1}{2} \int_0^T (u_1(0, t) - u_2(0, t))^2 dt + \frac{\kappa}{2} \int_0^T \left(D_1 \frac{\partial u_1}{\partial z}(0, t) - D_2 \frac{\partial u_2}{\partial z}(0, t) \right)^2 dt \\ &= J_1(p_1, p_2) + \kappa J_2(p_1, p_2) \end{aligned} \quad (3.13)$$

La constante κ permet de pondérer pour que la minimisation agisse de manière équivalente sur J_1 et sur J_2 .

Pour notre étude, les paramètres de Robin p_1 et p_2 que l'on souhaite contrôler sont supposés variables d'une itération k de la méthode de Schwarz à la suivante. Dans ce cas la fonction coût que l'on cherchera à minimiser à chaque itération de Schwarz sera

$$J(p_1^k, p_2^k) = \frac{1}{2} \int_0^T (u_1^k(0, t) - u_2^k(0, t))^2 dt + \frac{\kappa}{2} \int_0^T \left(D_1 \frac{\partial u_1^k}{\partial z}(0, t) - D_2 \frac{\partial u_2^k}{\partial z}(0, t) \right)^2 dt \quad (3.14)$$

En effet, puisque nous recherchons les paramètres assurant une vitesse de convergence la plus rapide possible, il est donc pertinent de recalculer ces paramètres à chaque itération pour que ceux-ci soient spécialement calculés pour faire converger les fréquences présentes dans l'erreur résiduelle. L'objectif à terme de cette méthodologie serait de pouvoir déterminer les paramètres qui permettent en un certain nombre (fixé à l'avance) d'itérations d'obtenir la meilleure approximation possible de la solution convergée. En effet, pour des raisons de coût de calcul, on peut vouloir (ou devoir) se limiter à seulement deux ou trois itérations. Dans ce cas une telle approche paraît particulièrement appropriée.

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

Une autre stratégie aurait pu être de minimiser le résultat à une itération K fixée. Dans ce cas la fonction à minimiser serait

$$J \left((p_1^k, p_2^k)_{k=1, K} \right) = \frac{1}{2} \int_0^T (u_1^K(0, t) - u_2^K(0, t))^2 dt + \frac{\kappa}{2} \int_0^T \left(D_1 \frac{\partial u_1^K}{\partial z}(0, t) - D_2 \frac{\partial u_2^K}{\partial z}(0, t) \right)^2 dt \quad (3.15)$$

ce qui revient à optimiser sur $2K$ paramètres à la fois.

Nous avons choisi ici de résoudre un problème de minimisation de la fonction coût à chaque itération de Schwarz. Pour la première itération, l'algorithme de minimisation est initialisé avec les valeurs optimales des paramètres de Robin *two-sided* déterminées analytiquement dans la première partie de ce chapitre. La première étape est d'évaluer si la fonction coût $J(p_1, p_2)$ est facile à optimiser (i.e. si elle est convexe) et ainsi évaluer l'importance des valeurs d'initialisation de l'algorithme de minimisation. Pour des valeurs particulières des paramètres du problème (coefficients de diffusion, taille des sous-domaines etc ...) la fonction coût correspondant à 1 itération de Schwarz est représentée sur la figure 3.4 pour un ensemble de valeurs de p_1 et p_2 . On remarque que l'utilisation des paramètres analytiques (représentés par un point noir sur la figure 3.4) permet une bonne initialisation de l'algorithme de minimisation car la valeur de la fonction coût obtenue à partir de ces paramètres est proche de la zone d'optimalité (zone hachurée).

Afin d'analyser la pertinence de l'approche par contrôle optimal on compare les valeurs de la fonction coût par optimisation à chaque itération de Schwarz avec celles obtenues analytiquement sur un problème continu. Les résultats pour un cas avec des coefficients de diffusion constants et discontinus ($D_1 = 10^{-2} m^2 . s^{-1}$ et $D_2 = 10^{-3} m^2 . s^{-1}$) sont représentés sur la figure 3.5. Compte tenu de ce que nous avons dit précédemment nous nous intéressons uniquement à l'évolution de la fonction coût et de l'erreur sur les premières itérations (les 5 premières ici). Les résultats confirment que le fait de minimiser la fonction coût (3.13) fait bien décroître les erreurs à chaque itération. Lorsque la résolution du problème est dégradée, il n'est pas étonnant de constater que les paramètres optimaux (déterminés sur un problème continu) deviennent moins efficaces. Plus généralement l'approche par contrôle optimal permettra d'analyser la sensibilité des paramètres optimaux aux paramètres du problème (discrétisation, coefficients de diffusion, variabilité de ces coefficients, etc ...). Cette méthode sera particulièrement intéressante dans les situations où l'on traite un problème complexe (coûteux en temps de calcul) qui peut être approché par un problème plus simple (rapide à résoudre) sur lequel on pourra effectuer l'étape d'optimisation.

3.8 Optimisation par méthode de contrôle optimal

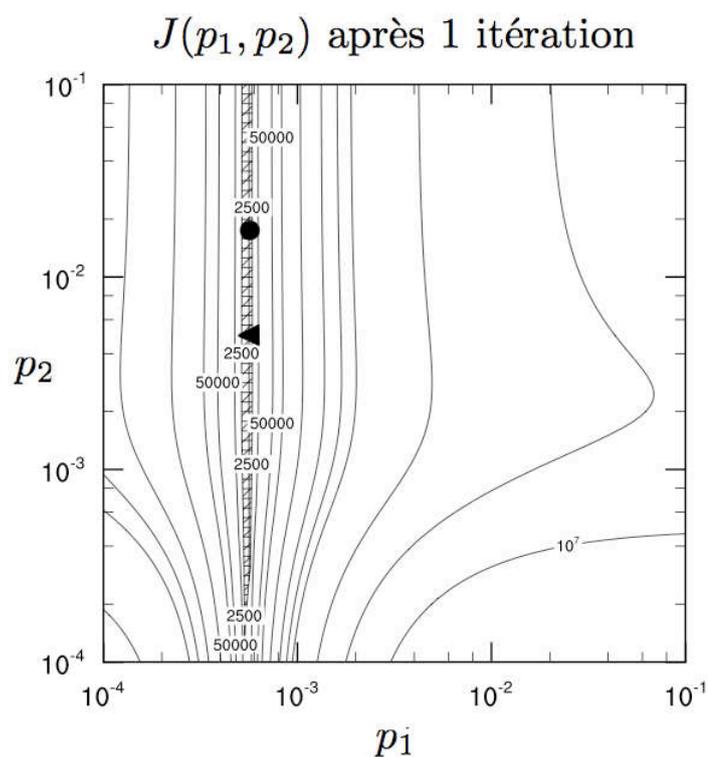


Fig. 3.4: Evolution de la fonction coût en fonction des paramètres de Robin p_1 et p_2 à la première itération de Schwarz. La partie hachurée correspond à $J(p_1, p_2) < 2500$. Les paramètres du problème sont $\Delta t = 100s$, $n_t = 100$, $L_1 = L_2 = 100m$, $D_1 = 10^{-2}m^2.s^{-1}$, $D_2 = 10^{-3}m^2.s^{-1}$ et $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1m$. Dans ce cas les paramètres optimaux analytiques (localisés par un point noir sur la figure) sont $p_1^* = 0.00056894$ et $p_2^* = 0.017461$. Le minimum de la fonction coût est dénoté par un triangle.

3. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET CONSTANTS

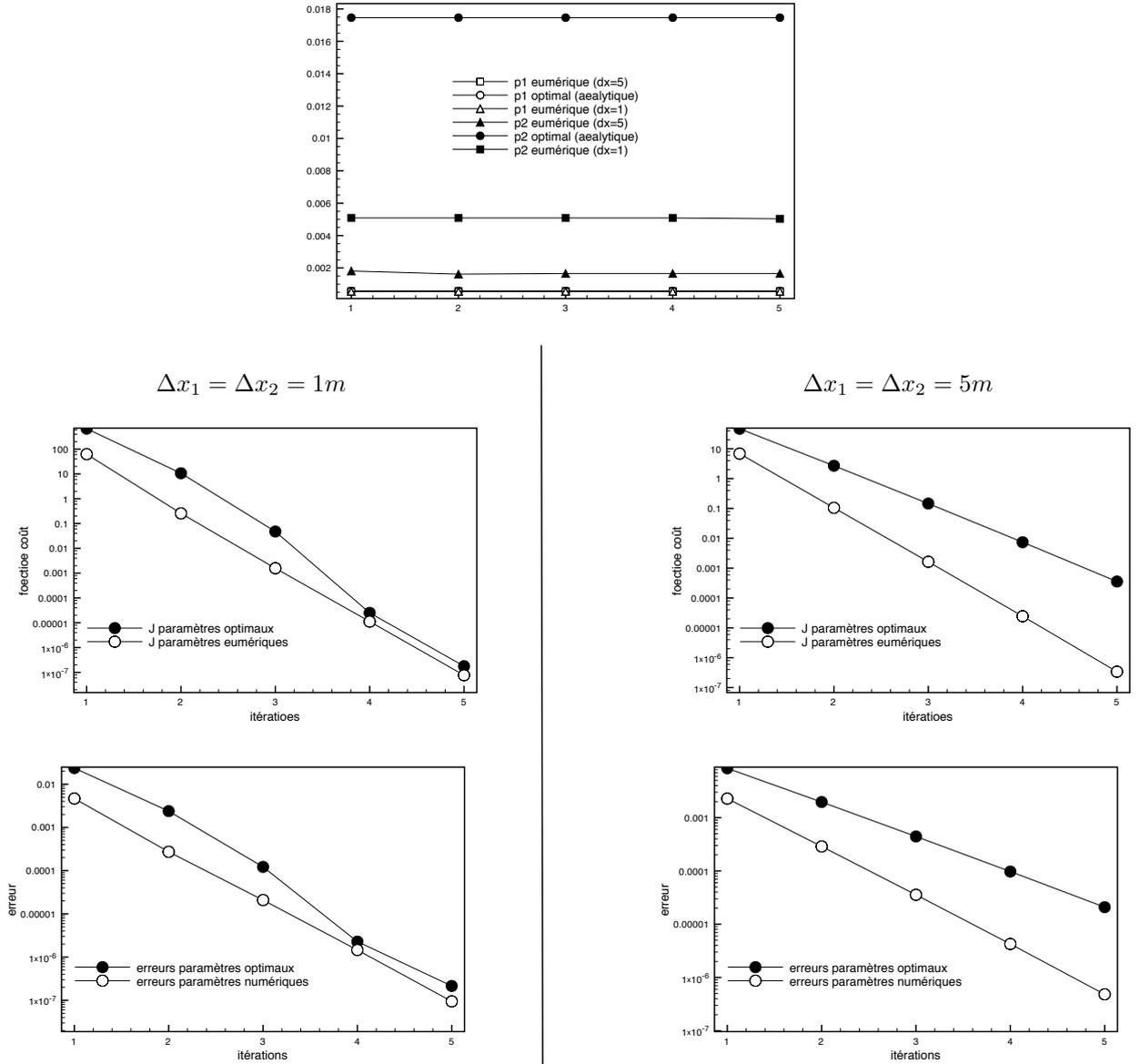


Fig. 3.5: Figure du haut : évolution des paramètres de Robin optimaux calculés numériquement pour $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1m$ et $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 5m$ en fonction des itérations. Les paramètres optimaux obtenus analytiquement dans le chapitre 3 sont également représentés. Les figures de gauche montrent l'évolution de la fonction coût et de l'erreur (en échelle logarithmique) sur la valeur à l'interface pour $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1m$. L'erreur est calculée par la formule

$$\sqrt{\frac{1}{n_t} \sum_{i=1}^{n_t} (u^k(0, t_i) - u^*(0, t_i))^2}.$$

Les paramètres du problème sont les mêmes que pour la figure 3.4. .

4

Algorithme de Schwarz optimisé pour un problème de diffusion à coefficients discontinus et variables

Sommaire

4.1	Introduction	122
4.1.1	General context	122
4.1.2	Model problem and Schwarz algorithm	123
4.1.3	Reminder of the results in the case of constant diffusion coefficients	123
4.2	OSM for diffusion problems with spatially variable coefficients	124
4.2.1	Analytical determination of the shape of the errors	124
4.2.2	Convergence factor of the <i>Dirichlet-Neumann</i> algorithm with spatially variable coefficients	127
4.2.3	Convergence factor of the <i>Robin-Robin</i> algorithm with spatially variable coefficients	129
4.3	Numerical results	130
4.3.1	Discretization and initial conditions	130
4.3.2	Testcase # 1	131
4.3.3	Testcase # 2 : parabolic diffusion profiles	134
4.4	Conclusion	135

Dans le chapitre précédent, une étude détaillée des propriétés de convergence de l'algorithme de Schwarz global en temps a été effectuée. Celle-ci était axée sur le couplage de

4. ALGORITHME DE SCHWARZ OPTIMISÉ POUR UN PROBLÈME DE DIFFUSION À COEFFICIENTS DISCONTINUS ET VARIABLES

deux équations de diffusion à coefficients constants. Nous proposons dans la seconde partie de notre étude de traiter le problème avec des coefficients variables. Pour ce faire nous proposons une approche nouvelle pour déterminer analytiquement l'expression du facteur de convergence de cet algorithme. Il sera alors possible de procéder numériquement à l'optimisation de ce facteur de convergence pour déterminer des conditions optimisées d'ordre 0 *two-sided*. Les résultats théoriques sont ensuite illustrés par des tests numériques dans le cas de conditions d'interface de type *Robin-Robin* et *Dirichlet-Neumann*.

Résumé des résultats de l'article "Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 2 : the variable coefficients case"

L'objectif de cette étude est d'évaluer l'impact de la variabilité spatiale des coefficients de diffusion sur la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz correspondant. La méthode habituelle de démonstration de convergence dans le domaine de Fourier, introduite dans le chapitre 3, n'est plus utilisable lorsque des coefficients variables sont considérés. Nous proposons donc une méthodologie pour circonvenir à ce problème. Le principe est d'étudier les équations décrivant l'évolution des erreurs sur chaque sous-domaine et à chaque itération dans le domaine physique. Pour ce faire on recherche des solutions par une méthode de séparation des variables sur un problème homogène obtenu après relèvement du problème de départ. On choisira ce relèvement comme la solution du problème à coefficients constants. On cherche ensuite la solution du problème sous la forme d'une somme infinie de variables séparées. Les fonctions de base de cette décomposition correspondent aux fonctions propres associées à un problème de Sturm-Liouville régulier. Finalement, afin de pouvoir exprimer le relèvement de manière explicite, l'erreur est exprimée dans le domaine de Fourier. Grâce à cette étude, nous avons établi la forme des erreurs de l'algorithme et par conséquent le facteur de convergence de celui-ci.

L'un des intérêts de cette approche est qu'il sera possible de caractériser les coefficients variables par une valeur "efficace" constante ayant le même impact sur le facteur de convergence. Il serait ainsi possible d'utiliser directement les formules analytiques déterminées dans le chapitre 3 dans le cas à coefficients constants. Dans un cas *Dirichlet-Neumann* nous pouvons clairement déterminer ces valeurs "efficaces" sur chaque sous-domaine. Ces valeurs sont une fonction de la fréquence ω . Une étude numérique montre que, pour des hautes fréquences, la valeur efficace est très proche de la valeur du coefficient à l'interface

entre les sous-domaines, alors que pour des basses fréquences ces deux valeurs diffèrent significativement. Sur un cas *Robin-Robin*, on vérifie que les valeurs "efficaces" déterminées précédemment dans le cas *Dirichlet-Neumann* demeurent pertinentes, avec la même sensibilité à la fréquence ω . Pour des profils de diffusion paraboliques (comme ceux que l'on peut observer dans les couches limites près de l'interface air-mer), on observe que la variabilité des coefficients, pour des basses fréquences, fournit un saut à l'interface entre les valeurs de diffusion efficaces plus important que pour les hautes fréquences. Ce résultat est très intéressant car cela signifie que le ralentissement de la convergence dû aux basses fréquences peut être compensé par une accélération de la convergence venant de l'accroissement de la discontinuité à l'interface (au niveau des valeurs efficaces). On pourra donc espérer, grâce à la variabilité des coefficients, que la vitesse de convergence de la méthode soit seulement faiblement dépendante de ω .

TOWARDS AN OPTIMIZED GLOBAL-IN-TIME SCHWARZ ALGORITHM FOR DIFFUSION EQUATIONS WITH DISCONTINUOUS AND SPATIALLY VARIABLE COEFFICIENTS

PART 2 : THE VARIABLE COEFFICIENTS CASE

FLORIAN LEMARIÉ *, LAURENT DEBREU[†], AND ERIC BLAYO[‡]

Abstract. This paper is the second part of a study of global-in-time non-overlapping Schwarz method applied to the one dimensional diffusion equation. The first part was dedicated to the study of the case of constant (but discontinuous) coefficients. In the present study we address the problem with spatially variable coefficients. We derive a new approach to determine the convergence factor of the algorithm, which enables to optimize the convergence speed. The theoretical results are illustrated by numerical experiments in the case of *Robin-Robin* and *Dirichlet-Neumann* interface conditions.

Key words. domain decomposition, waveform relaxation, Schwarz methods

AMS subject classifications. 65M55, 35K15, 76F40

1. Introduction.

1.1. General context. The overall context of the present work is the coupling between ocean and atmosphere models, in particular for representing processes in which the interactions between the two media are of prime importance (e.g. tropical cyclones). The algorithms generally used to couple ocean and atmosphere models are often not fully correct from a mathematical point of view, in the sense that they do not ensure a perfect consistency of the fluxes which are exchanged between both media, see for example [11]. In this context, the ultimate goal of our work is to derive alternative numerical techniques ensuring such a consistency, and to study their possible impact on the physical results of coupled models. Global-in-time *Optimized Schwarz Methods* (also called Schwarz waveform relaxation methods) [5], based on the concept of absorbing boundary conditions [4], are methods which seem particularly well suited for such applications. That is why the aim of the present work is to investigate such methods for properly exchanging vertical fluxes between two different media.

In the first part of this paper [8], we studied the case of a constant diffusion coefficient in each medium, with a discontinuity through the interface. However this is a very crude simplification of the true physics. Ocean and atmosphere interact through different complex physical processes, and it is in particular of paramount importance to properly take into account the turbulent boundary layers on both sides of the air-sea interface. In order to parameterize the effects of those boundary layers a turbulent diffusion term is defined (e.g. [13] [7]), with a large spatial variability to account for local effects. Indeed a parameterization with a constant diffusion,

* Corresponding author, University of Grenoble, Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (florian.lemarie@imag.fr, phone : +33 4 76 63 54 98, fax : +33 4 76 63 12 63)

[†]INRIA Grenoble Rhône-Alpes, Montbonnot, 38334 Saint Ismier Cedex, France and Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (laurent.debreu@imag.fr, phone : +33 4 76 51 48 60, fax : +33 4 76 63 12 63)

[‡]University of Grenoble, Jean Kuntzmann Laboratory, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France (eric.blayo@imag.fr, phone : +33 4 76 63 59 63, fax : +33 4 76 63 12 63)

originally introduced in [3], is now known to be naive. In this second part of the paper, we intend to study the impact of this variability of the diffusion coefficients, in particular in the vicinity of the interface, on the convergence properties of the Schwarz algorithm. To our knowledge, the spatial variability of the coefficients has never been considered in the framework of Schwarz-like methods, except in [9] where absorbing conditions are given for the stationary case.

1.2. Model problem and Schwarz algorithm. The present study focus on the coupling between two 1-D diffusion equations with variable coefficients. Let $\Omega_1 = [-L_1, 0]$ and $\Omega_2 = [0, L_2[$ be two subdomains with a common interface $\Gamma = \{x = 0\}$. The coupling problem reads

$$(1.1) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_1 u_1 = f & \text{in } \Omega_1 \times [0, T] \\ u_1(x, 0) = u_o(x) & x \in \Omega_1 \\ \mathcal{B}_1 u_1(-L_1, t) = g_1 & t \in [0, T] \\ \mathcal{F}_1 u_1(0, t) = \mathcal{F}_2 u_2(0, t) & \text{on } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_2 u_2 = f & \text{in } \Omega_2 \times [0, T] \\ u_2(x, 0) = u_o(x) & x \in \Omega_2 \\ \mathcal{B}_2 u_2(L_2, t) = g_2 & t \in [0, T] \\ \mathcal{G}_2 u_2(0, t) = \mathcal{G}_1 u_1(0, t) & \text{on } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right.$$

where $\mathcal{L}_j = \partial_t - \partial_x(D_j(x)\partial_x)$, \mathcal{B}_j defines the exterior boundary conditions, \mathcal{F}_j and \mathcal{G}_j are two operators defining the interface conditions. Those operators must be designed to ensure some given consistency of the solution through Γ . In our study we require the equality of subproblems solutions and of their normal fluxes.

In order to solve the coupling problem (1.1), we propose to implement a Schwarz algorithm with *Robin-Robin* interface conditions, namely

$$(1.2) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_1 u_1^k = f & \text{in } \Omega_1 \times [0, T] \\ u_1^k(x, 0) = u_o(x), & x \in \Omega_1 \\ \mathcal{B}_1 u_1^k(-L_1, t) = g_1 & t \in [0, T] \\ (D_1(0)\partial_x + \Lambda_1) u_1^k(0, t) = (D_2(0)\partial_x + \Lambda_1) u_2^{k-1}(0, t) & \text{on } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_2 u_2^k = f & \text{in } \Omega_2 \times [0, T] \\ u_2^k(x, 0) = u_o(x) & x \in \Omega_2 \\ \mathcal{B}_2 u_2^k(L_2, t) = g_2 & t \in [0, T] \\ (-D_2(0)\partial_x + \Lambda_2) u_2^k(0, t) = (-D_1(0)\partial_x + \Lambda_2) u_1^k(0, t) & \text{on } \Gamma \times [0, T] \end{array} \right.$$

where $k = 1, 2, \dots$ is the iteration number and the initial guess $u_2^0(0, t)$ is given. Λ_1 and Λ_2 are operators to be determined. As mentioned in [9], those operators can be either local or nonlocal operators.

1.3. Reminder of the results in the case of constant diffusion coefficients. We recall briefly here some preliminary results useful for the present study and detailed in [8]. The convergence study of algorithm (1.2) with constant coefficients is performed by introducing the errors $e_j^k = u_j^k - u^*$ between the k -th iterate and the exact solution u^* of the coupled problem. By mean of a Fourier transform in time, defined for each frequency ω by

$$(1.3) \quad \widehat{e}_j(x, \omega) = \mathcal{F}(e_j(x, t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} e_j(x, t) e^{-i\omega t} dt$$

the PDE $\mathcal{L}_j e_j = 0$ becomes an ODE $\widehat{\mathcal{L}}_j \widehat{e}_j = i\omega \widehat{e}_j - D_j \frac{\partial^2 \widehat{e}_j}{\partial x^2} = 0$ whose characteristic roots are (for $\omega \in R$):

$$(1.4) \quad \sigma_j^+ = \sqrt{\frac{i\omega}{D_j}} \quad \sigma_j^- = -\sigma_j^+ = -\sqrt{\frac{i\omega}{D_j}}$$

The following step is to assume that $L_j \rightarrow \infty$ and that e_j tends to zero for $x \rightarrow \infty$, which leads to

$$(1.5) \quad \widehat{e}_1^k(x, \omega) = \alpha^k(\omega) e^{\sigma_1^+ x} \quad \widehat{e}_2^k(x, \omega) = \beta^k(\omega) e^{\sigma_2^- x}$$

This is usually carried out to simplify the resulting convergence factor. Finally the convergence factor ρ corresponding to the ratio between errors at two successive iterations can be determined as a function of σ_j^\pm, D_j and λ_j (the Fourier symbols of Λ_j operators):

$$(1.6) \quad \rho = \left| \frac{(\lambda_1(\omega) + D_2 \sigma_2^-) (\lambda_2(\omega) - D_1 \sigma_1^+)}{(\lambda_1(\omega) + D_1 \sigma_1^+) (\lambda_2(\omega) - D_2 \sigma_2^-)} \right|$$

We remark that in the Fourier space the following symbols

$$(1.7) \quad \lambda_1^{\text{opt}} = -D_2 \sigma_2^- \quad \lambda_2^{\text{opt}} = D_1 \sigma_1^+$$

lead to $\rho = 0$, i.e. ensure a convergence in exactly two iterations. However the corresponding operators, which are called *absorbing* conditions, are nonlocal in time, and therefore cannot be used in practical applications. We thus need to look for local approximations of these optimal operators. It has first been suggested in [10] to use a low frequency approximation of the symbols based on a Taylor expansion about $\omega = 0$. This results in effective transmission conditions only for ω small. To obtain a more general approximation, effective for high frequencies, the so called *Optimized Schwarz Methods* (OSM) has been introduced. The simplest version consists in approximating λ_1^{opt} and λ_2^{opt} by two constant values p_1 and p_2 , which corresponds to Robin interface conditions (also called zeroth order *two-sided* transmission conditions). The values for p_1 and p_2 are then determined by solving the optimization problem

$$(1.8) \quad \min_{p_1, p_2 \in R} \left(\max_{\omega \in [\omega_{\min}, \omega_{\max}]} \rho(p_1, p_2, \omega) \right)$$

In this second part of the paper, we complement the preceding work and discuss the effect of the spatial variability of the diffusion coefficients on the convergence speed and on the determination of optimized conditions.

2. OSM for diffusion problems with spatially variable coefficients. As mentioned previously, the diffusion coefficient may be spatially variable to account for local effects (e.g. turbulent boundary layers) within subdomains. In practical applications (like in oceanography or meteorology) diffusion coefficients are likely to vary by a factor of 100 in the vertical direction. That is why we propose in this section a methodology to determine analytically the convergence factor for non constant diffusion coefficients, in the case of two subdomains. We will make the assumption that the diffusion profile does not vary with time.

2.1. Analytical determination of the shape of the errors. The first part of our study does not require any distinction between subdomains, so the j subscripts are temporarily removed. If we denote by $g(t)$ the function containing the information given by the neighbouring subdomain, we intend to study the problem:

$$(2.1) \quad \begin{cases} \partial_t e - \partial_x (D(x) \partial_x e) = 0 & x \in]0, L[, t > 0 \\ e(x, 0) = 0 & x \in]0, L[\\ -D(0) \partial_x e(0, t) + p e(0, t) = g(t) & t > 0 \\ e(L, t) = 0 & t > 0 \end{cases}$$

with $p \in R$ the Robin parameter we wish to determine to optimize the convergence speed. We decide to impose a Dirichlet condition at $z = L$, which corresponds to having $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = \text{Id}$ in (1.2).

First it is important to notice that the method based on a Fourier analysis commonly used to analytically determine the convergence factor, as described in [8] and briefly recalled in §1.3, is not applicable to our model problem with variable coefficients. Indeed, in Fourier space we obtain the ODE $i\omega \hat{e} - \partial_x (D(x) \partial_x \hat{e}) = 0$. The associated boundary value problem in Fourier space appears to be at least as complicated as the original problem in physical space. That is why we propose to study directly the system (2.1).

We have to tackle with an initial boundary problem with nonhomogeneous boundary conditions. First we transform this original problem with a homogeneous equation and nonhomogeneous boundary conditions into a problem with nonzero right-hand side but with homogeneous boundary conditions, by searching for a solution under the form $e(x, t) = \varphi(x, t) + U(x, t)$ with φ a lifting function satisfying the boundary conditions. The transformed problem reads

$$(2.2) \quad \begin{cases} \partial_t U - \partial_x (D(x) \partial_x U) = f(x, t) = -\partial_t \varphi + \partial_x (D(x) \partial_x \varphi) & x \in]0, L[, t > 0 \\ U(x, 0) = -\varphi(x, 0) & x \in]0, L[\\ -D(0) \partial_x U(0, t) + p U(0, t) = 0 & t > 0 \\ U(L, t) = 0 & t > 0 \end{cases}$$

The choice of φ is not unique. We choose this function as the solution of problem (2.1) with a constant diffusion coefficient whose value is the value at $x = 0$, i.e. φ is solution of

$$(2.3) \quad \begin{cases} \partial_t \varphi - D(0) \partial_{xx} \varphi = 0 & x \in]0, L[, t > 0 \\ -D(0) \partial_x \varphi(0, t) + p \varphi(0, t) = g(t) & t > 0 \\ \varphi(L, t) = 0 & t > 0 \end{cases}$$

Then we search for $U(x, t)$ under the form of a series with separate variables $U(x, t) = \sum_n \Phi_n(x) T_n(t)$. By substituting in (2.2) one gets

$$(2.4) \quad \sum_n T_n'(t) \Phi_n(x) - \sum_n T_n(t) \partial_x (D(x) \partial_x \Phi_n(x)) = f(x, t)$$

and we expand similarly the rhs into a series with respect to the functions $\Phi_n(x)$

$$(2.5) \quad f(x, t) = -\partial_t \varphi + \partial_x (D(x) \partial_x \varphi) = \sum_n f_n(t) \Phi_n(x)$$

The following step is now to properly choose the functions Φ_n . A relevant choice is supposed to enable us to transform the PDE into ODEs for unknown functions $\Phi_n(x)$ and $T_n(t)$. Therefore the natural choice for $\Phi_n(x)$ corresponds to the following *regular Sturm-Liouville* (SL) problem

$$(2.6) \quad \begin{cases} \partial_x (D(x) \partial_x \Phi_n) + \lambda_n^2 \Phi_n = 0 & x \in]0, L[\\ -D(0) \partial_x \Phi_n(0) + p \Phi_n(0) = 0 \\ \Phi_n(L) = 0 \end{cases}$$

with λ_n the eigenvalues of the SL operator. Such a choice leads to a family of functions $\Phi_n(x)$ which are orthonormal for the Euclidian scalar product $\langle u, v \rangle = \int_0^L u(x)v(x)dx$. The properties of regular SL problems are fully described in [6] or [1] and particular examples of the functions $\Phi_n(x)$ are shown in §3.2. After some simple algebra it turns out that a general solution of problem (2.1) is given by

$$(2.7) \quad e(x, t) = \varphi(x, t) + \sum_n \Phi_n(x) \int_0^t \exp(-\lambda_n^2(t - \tau)) f_n(\tau) d\tau$$

where φ satisfies (2.3), Φ_n satisfies (2.6) and $f_n(t)$ satisfies

$$(2.8) \quad f_n(t) = \int_0^L \partial_x (\tilde{D}(x) \partial_x \varphi) \Phi_n(x) dx \quad \text{with } \tilde{D}(x) = D(x) - D(0)$$

By formulating the solution of our problem under this form we can properly separate the error into two parts corresponding to two different contributions. Indeed $\varphi(x, t)$ corresponds to the error for a constant coefficient which value is $D(0)$ and $\sum_n \Phi_n(x) \int_0^t \exp(-\lambda_n^2(t - \tau)) f_n(\tau) d\tau$ represents the errors coming from the perturbations around $D(0)$, namely $\tilde{D}(x)$.

We must now determine explicitly the function φ which is part of $e(x, t)$ and which is also involved in the computation of $f_n(t)$. This is probably not relevant to try to solve (2.3) in physical space because it would result in expressing φ as a series, which would lead to a quite complicated expression for f_n 's as well as for $e(x, t)$. A more straightforward way consists in using the continuous Fourier transform defined in (1.3). By taking into account the boundary conditions in 0 and L , one gets

$$(2.9) \quad \hat{\varphi}(x, \omega) = \frac{\left(e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x} - e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}(2L-x)} \right)}{p \left(1 - e^{2\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}L} \right) - \sqrt{i\omega D(0)} \left(1 + e^{2\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}L} \right)} \hat{g}(\omega)$$

Since the inverse Fourier transform of this expression is very complicated to determine, the entire error (2.7) must be expressed in the Fourier space. The f_n 's are extended by zero for $t < 0$ and by the convolution theorem we have

$$\mathcal{F} \left\{ \int_0^t \exp(-\lambda_n^2(t - \tau)) f_n(\tau) d\tau \right\} = \hat{s}_n(\omega) \hat{f}_n(\omega) \quad \text{with } \hat{s}_n(\omega) = \mathcal{F} \left(e^{-\lambda_n^2 t} H(t) \right) = \frac{1}{\lambda_n^2 + i\omega}$$

where $H(t)$ is the Heaviside unit step function. The general form for $\hat{e}(x, \omega)$ is

$$(2.10) \quad \hat{e}(x, \omega) = \hat{\varphi}(x, \omega) + \sum_n \Phi_n(x) \hat{s}_n(\omega) \hat{f}_n(\omega)$$

In practice it is usually assumed that the subdomains are unbounded ($L \rightarrow \infty$) to simplify the expression of the convergence factor and thus to simplify the optimisation problem. In order to simplify (2.9) we make the assumption that $L \rightarrow \infty$. The expression of $\hat{\varphi}$ can be then approximated by

$$(2.11) \quad \hat{\varphi}(x, \omega) \simeq \frac{\exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x\right)}{p + \sqrt{i\omega D(0)}} \hat{g}(\omega)$$

This implies

$$(2.12) \quad \hat{f}_n(\omega) \simeq \frac{\hat{g}(\omega)}{p + \sqrt{i\omega D(0)}} \int_0^L \frac{\partial}{\partial x'} \left(\tilde{D}(x') \frac{\partial}{\partial x'} \exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x'\right) \right) \Phi_n(x') dx'$$

Finally as a result of our study one can propose an expression for the error function in Fourier space that takes into account the spatial variability of the diffusion coefficient:

$$(2.13) \quad \begin{aligned} \hat{e}(x, \omega) \simeq & \frac{\hat{g}(\omega)}{p + \sqrt{i\omega D(0)}} \left[\exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x\right) \right. \\ & \left. + \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}} \Phi_n(x)}{i\omega + \lambda_n^2} \int_0^L \tilde{D}(x') \exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x'\right) \frac{d\Phi_n}{dx'} dx' \right] \quad x \geq 0 \end{aligned}$$

This error has been constructed on the bounded domain $[0, L]$ which can be identified to subdomain Ω_2 , with the notations of §1.2. For $x \in [-L, 0]$ (i.e. on Ω_1) we obtain a very similar form:

$$(2.14) \quad \begin{aligned} \hat{e}(x, \omega) \simeq & \frac{\hat{h}(\omega)}{p + \sqrt{i\omega D(0)}} \left[\exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x\right) \right. \\ & \left. - \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}} \Phi_n(x)}{i\omega + \lambda_n^2} \int_{-L}^0 \tilde{D}(x') \exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x'\right) \frac{d\Phi_n}{dx'} dx' \right] \quad x \leq 0 \end{aligned}$$

where the function h is the analogous of function g previously introduced.

The form of the error proposed in (2.13) is interesting because it is in good agreement with existing inferences about the impact of the spatial variability of coefficients on the convergence speed. Indeed, there exists such inferences in [2] based on a study of a two-dimensional steady-state diffusion problem. It is suggested that if we look at the diffusion coefficient only locally (i.e. the interface value) we are making a good approximation for high frequencies and a bad one for low frequencies. It is also inferred that neither the values of the diffusion coefficient far from the interface nor the boundary condition at $x = L_j$ are supposed to affect the convergence for high frequencies. Those intuitions are fully consistent with our analytical study. The term $\tilde{D}(x)$ which corresponds to the variability of the coefficient is weighted by $e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x}$ which makes this variability negligible for large values of ω but potentially significant for low frequencies. Moreover we can draw the same remark for the variations with x : when x is small (near the interface) $\tilde{D}(x)$ is weighted by a non negligible number while for x large enough $e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D(0)}}x}$ is almost zero.

2.2. Convergence factor of the *Dirichlet-Neumann* algorithm with spatially variable coefficients. We have established so far a general form for the errors propagating in each subdomain. We are now able to propose a formulation of the convergence speed for the global-in-time Schwarz algorithm with spatially variable coefficients. Before dealing with the general Robin-Robin case we intend to determine the convergence speed in a simpler Dirichlet-Neumann case, i.e. with the notations of (1.1) $\mathcal{G}_j = \text{Id}$ and $\mathcal{F}_j = D_j(0) \frac{\partial}{\partial x}$. Moreover, for sake of practical convenience, we will try to find the expression of an "effective" value D_j^{eff} , which would be a constant value that would have the same effect on the convergence speed as the whole non constant diffusion profile $D_j(x)$. Hereafter we use again the subscripts j to characterize both subdomains.

A derivation very similar to what was done in section 2.1, but with a Dirichlet boundary condition instead of a Robin boundary condition leads to:

$$\widehat{e}_2(x, \omega) = \left(e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}}x} + \sum_n \sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}} \frac{\Phi_{n,2}(x)}{i\omega + \lambda_{n,2}^2} \int_0^{L_2} \widetilde{D}_2(x') e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}}x'} \frac{d\Phi_{n,2}(x')}{dx'} dx' \right) \widehat{g}(\omega) \quad (2.15)$$

where $\widehat{g}(\omega) = \widehat{e}_1(0, \omega)$ and where the $\Phi_{n,2}$ are defined by a SL problem similar to (2.6), but again with a Dirichlet condition instead of a Robin condition. On Ω_1 , we have (by simply making $p = 0$ in the derivation of section 2.1):

$$\widehat{e}_1(x, \omega) = \left(e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}}x} - \sum_n \sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} \frac{\Phi_{n,1}(x)}{i\omega + \lambda_{n,1}^2} \int_{-L_1}^0 \widetilde{D}_1(x') e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}}x'} \frac{d\Phi_{n,1}(x')}{dx'} dx' \right) \frac{\widehat{h}(\omega)}{\sqrt{i\omega D_1(0)}} \quad (2.16)$$

where $\widehat{h}(\omega) = D_2(0) \frac{\partial \widehat{e}_2}{\partial x}(0, \omega)$ and where the $\Phi_{n,1}$ are defined by a SL problem similar to (2.6), but again with $p = 0$, i.e. with a Neumann condition instead of a Robin condition.

Therefore the multiplicative Schwarz algorithm with Dirichlet-Neumann conditions corresponds to having \widehat{e}_2^k and $\widehat{g}^k(\omega) = \widehat{e}_1^k(0, \omega)$ instead of \widehat{e}_2 and \widehat{g} in (2.15), and \widehat{e}_1^k and $\widehat{h}^{k-1}(\omega) = D_2(0) \frac{\partial \widehat{e}_2^{k-1}}{\partial x}(0, \omega)$ instead of \widehat{e}_1 and \widehat{h} in (2.16). So we have:

$$\begin{aligned} \widehat{g}^k(\omega) &= \left(1 - \sum_n \sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} \frac{\Phi_{n,1}(0)}{i\omega + \lambda_{n,1}^2} \int_{-L_1}^0 \widetilde{D}_1(x') e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}}x'} \frac{d\Phi_{n,1}(x')}{dx'} dx' \right) \frac{1}{\sqrt{i\omega D_1(0)}} \widehat{h}^{k-1}(\omega) \\ \widehat{h}^k(\omega) &= \left(-1 + \sum_n \frac{\frac{d\Phi_{n,2}(0)}{dx}}{i\omega + \lambda_{n,2}^2} \int_0^{L_2} \widetilde{D}_2(x') e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}}x'} \frac{d\Phi_{n,2}(x')}{dx'} dx' \right) \sqrt{i\omega D_2(0)} \widehat{g}^k(\omega) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Therefore, if we define a convergence rate by

$$\rho_{DN}^{var}(\omega) = \left| \frac{\widehat{e}_1^k(0, \omega)}{\widehat{e}_1^{k-1}(0, \omega)} \right| \quad (2.18)$$

the preceding relations lead to

$$\rho_{DN}^{var}(\omega) = \left| \frac{\widehat{g}^k}{\widehat{g}^{k-1}} \right| = \left| \frac{\widehat{g}^k}{\widehat{h}^{k-1}} \frac{\widehat{h}^{k-1}}{\widehat{g}^{k-1}} \right| = \rho_{DN}^{cst} \cdot \widetilde{\rho}_{DN} \quad (2.19)$$

where $\rho_{DN}^{cst} = \sqrt{\frac{D_2(0)}{D_1(0)}}$ is the convergence factor obtained in the case of constant diffusion coefficients (see [12]) and

$$(2.20) \quad \tilde{\rho}_{DN} = \left| \left(1 - \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)} \Phi_{n,1}(0)}}{i\omega + \lambda_{n,1}^2} \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x') e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)} x'} \frac{d\Phi_{n,1}(x')}{dx'}} dx' \right) \left(1 - \sum_n \frac{\frac{d\Phi_{n,2}(0)}{dz}}{i\omega + \lambda_{n,2}^2} \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)} x} \frac{d\Phi_{n,2}(x)}{dx}} dx \right) \right|$$

This result is interesting since we clearly see that the convergence factor ρ_{DN}^{var} is the product of the convergence factor with constant coefficients (the surface values) by a term coming from the spatial variability of the diffusion coefficient on Ω_1 and Ω_2 .

We can thus suggest "effective" constant values for D_1 and D_2 , which would have a similar effect on the convergence speed than the non constant vertical profiles $D_1(x)$ and $D_2(x)$, i.e. $\rho_{DN}^{var} = \sqrt{\frac{D_2^{eff}(\omega)}{D_1^{eff}(\omega)}}$ with

$$(2.21) \quad D_1^{eff}(\omega) = \frac{D_1(0)}{\left| 1 - \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)} \Phi_{n,1}(0)}}{i\omega + \lambda_{n,1}^2} \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x') e^{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)} x'} \frac{d\Phi_{n,1}(x')}{dx'}} dx' \right|^2}$$

and respectively

$$(2.22) \quad D_2^{eff}(\omega) = D_2(0) \left| 1 - \sum_n \frac{\frac{d\Phi_{n,2}(0)}{dz}}{i\omega + \lambda_{n,2}^2} \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)} x} \frac{d\Phi_{n,2}(x)}{dx}} dx \right|^2$$

It is important to note that, due to the variability of the coefficients, the convergence factor is a function of the time frequency ω whereas this dependency does not exist with constant coefficients.

2.3. Convergence factor of the Robin-Robin algorithm with spatially variable coefficients. In this section we determine the convergence factor ρ_{RR}^{var} in the more general case of Robin-Robin interface conditions. Thanks to (2.13) and (2.14), we can express \hat{e}_1 and \hat{e}_2 in a compact form for iterate k

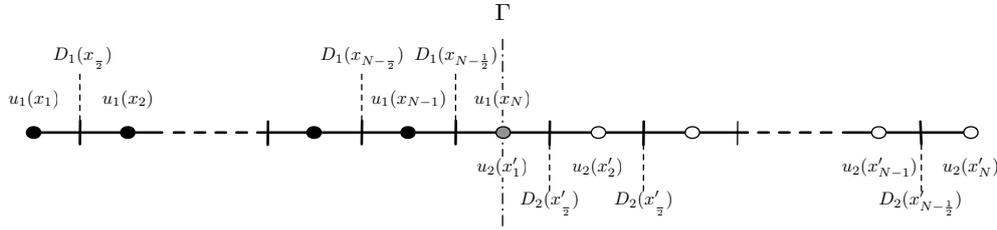
$$(2.23) \quad \begin{cases} \hat{e}_1^k(\omega, 0) = \mathcal{K}_1(\omega, D_1(0), \Phi_{n,1}, \lambda_{n,1}, p_1) \hat{h}^{k-1} \\ \hat{e}_2^k(\omega, 0) = \mathcal{K}_2(\omega, D_2(0), \Phi_{n,2}, \lambda_{n,2}, p_2) \hat{g}^k \end{cases}$$

where $\hat{g} = -D_1(0)\partial_x \hat{e}_1(0, \omega) + p_2 \hat{e}_1(0, \omega)$ and $\hat{h} = D_2(0)\partial_x \hat{e}_2(0, \omega) + p_1 \hat{e}_2(0, \omega)$. The problem on the interface $x = 0$ is given by the relations

$$(2.24) \quad \begin{cases} (D_1(0)\partial_x + p_1) \hat{e}_1^k(0, \omega) = (D_2(0)\partial_x + p_1) \hat{e}_2^{k-1}(0, \omega) = \hat{h}^{k-1} \\ (-D_2(0)\partial_x + p_2) \hat{e}_2^k(0, \omega) = (-D_1(0)\partial_x + p_2) \hat{e}_1^k(0, \omega) = \hat{g}^k \end{cases}$$

By combining (2.23) and (2.24) one gets:

$$(2.25) \quad \begin{cases} D_1(0)\partial_x \hat{e}_1^k(0, \omega) = \hat{h}^{k-1} - p_1 \hat{e}_1^k(0, \omega) = (1 - p_1 \mathcal{K}_1) \hat{h}^{k-1} \\ -D_2(0)\partial_x \hat{e}_2^k(0, \omega) = \hat{g}^k - p_2 \hat{e}_2^k(0, \omega) = (1 - \mathcal{K}_2 p_2) \hat{g}^k \end{cases}$$

FIG. 3.1. *Spatial organisation and indexing of the numerical grid*

By substituting this in (2.24) we finally get a relation linking \hat{g} and \hat{h}

$$(2.26) \quad \begin{cases} \hat{g}^k &= ((p_1 + p_2)\mathcal{K}_1 - 1)\hat{h}^{k-1} \\ \hat{h}^{k-1} &= ((p_1 + p_2)\mathcal{K}_2 - 1)\hat{g}^{k-1} \end{cases}$$

which leads to the expression of the convergence factor:

$$(2.27) \quad \rho_{RR}^{var} = \left| \frac{\hat{g}^k}{\hat{g}^{k-1}} \right| = |[(p_1 + p_2)\mathcal{K}_1 - 1] [(p_1 + p_2)\mathcal{K}_2 - 1]|$$

The exact formulation of each term involved in the computation of ρ_{RR}^{var} is described appendix A.

We can note that this expression of the convergence factor is consistent with the expression (1.6) which was obtained in the case of constant (but discontinuous) coefficients. Indeed, if we set $\tilde{D}_1(x) = \tilde{D}_2(x) = 0$ in (2.27), we have then $\mathcal{K}_j = 1/\sqrt{i\omega D_j(0)}$, which leads to (1.6) (with $\lambda_j = p_j$ and $D_j\sigma_j^\pm = \pm\sqrt{i\omega D_j(0)}$).

3. Numerical results. In this section we intend to check numerically the validity of the theoretical results found in section 2. To do this, first, we describe the discretization of our model problem and then we design a few experiments to illustrate the relevancy of our approach.

3.1. Discretization and initial conditions. We choose to define two subdomains of equal sizes: $\Omega_1 =]-L, 0[$ and $\Omega_2 =]0, L[$. The model problem (1.2) is discretized using a finite difference method on a staggered grid in space and an implicit scheme in time. Actually the discrete values of u are calculated at the centers of the cells, and the diffusion coefficients are located on the edges of the cells. The indexing is described on figure 3.1. The index for the values of u range from 1 to N , while the index for the values of the diffusion coefficient range from $\frac{3}{2}$ to $N + \frac{1}{2}$. The diffusion operator $\mathcal{D} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial}{\partial x} \right)$ is discretized using the following second order formula for interior points:

$$(3.1) \quad \mathcal{D}_h u(x_i) = \frac{2}{h_{i+1} + h_i} \left[\frac{D(x_{i+1/2})}{h_{i+1}} (u(x_{i+1}) - u(x_i)) - \frac{D(x_{i-1/2})}{h_i} (u(x_i) - u(x_{i-1})) \right]$$

with $h_i = x_i - x_{i-1}$.

We must provide an initial condition to our model problem. In order to fulfill the assumption made for the convergence study, this initial condition must satisfy the

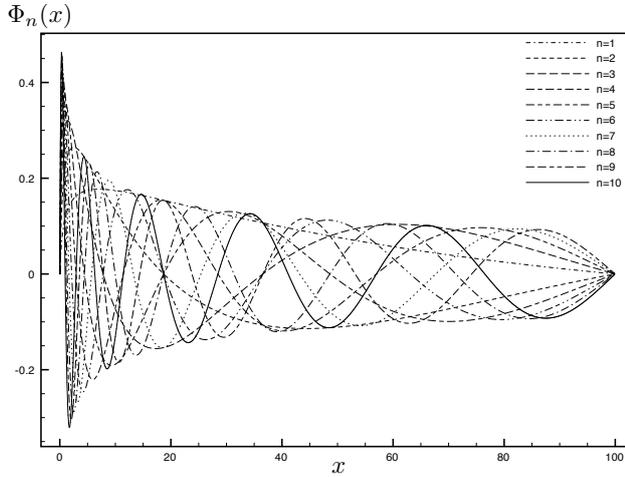


FIG. 3.2. Ten first eigenfunctions $\Phi_{n,2}$ for $L = 100$.

compatibility conditions (i.e. the equality of the values and of the normal fluxes) at $x = 0$. This can be done by considering for instance the functions

$$(3.2) \quad u_1(x, 0) = 20 + e^{\frac{x}{a_1}} \quad u_2(x, 0) = 22 - e^{-\frac{x}{a_2}} \quad \text{with} \quad \frac{a_1}{a_2} = \frac{D_1(0)}{D_2(0)}$$

The first iteration of the Schwarz algorithm requires to provide a first guess for $h^0(t) = (D_2(0)\partial_x u_2^0 + p_1 u_2^0)(0, t)$. We choose a random function following a uniform law, in order to generate a wide range of the temporal frequencies allowed by our temporal grid.

Finally we have to choose the functions $D_j(x)$ to complete the definition of our model problem. We will propose in the following two kinds of configurations.

3.2. Testcase # 1. Let us consider first a configuration with a constant coefficient D_1 on Ω_1 and a variable coefficient $D_2(x) = (1 + 3x)^{4/3}$ on Ω_2 . This particular profile was chosen because it makes it possible to solve analytically the regular Sturm-Liouville problem (2.6) and to avoid the pitfalls of the numerical evaluation of eigenvalues and eigenfunctions.. In the case of *Dirichlet-Neumann* conditions, like in §2.2, we have a Dirichlet condition in Ω_2 , and the eigenvalues $\lambda_{n,2}$ and eigenfunctions $\Phi_{n,2}$ associated to $D_2(x)$ are

$$(3.3) \quad \Phi_{n,2}(x) = \sqrt{\frac{2}{(1+3L)^{1/3} - 1}} \left(\frac{\sin(\lambda_{n,2}((1+3x)^{1/3} - 1))}{(1+3x)^{1/3}} \right) \quad \lambda_{n,2} = \frac{n\pi}{(1+3L)^{1/3} - 1}$$

The ten first eigenfunctions $\Phi_{n,2}(x)$ are shown on figure 3.2. We have used $n_{max} = 50$ eigenfunctions in our actual calculations.

As described in §2.2 it is possible to find a spatially constant value D_j^{eff} which has the same effect as the spatially variable profile $D_j(x)$ on the convergence speed. Those values appear naturally when considering a *Dirichlet-Neumann* case. We propose to study the evolution of the effective value D_2^{eff} with respect to the time frequencies ω .

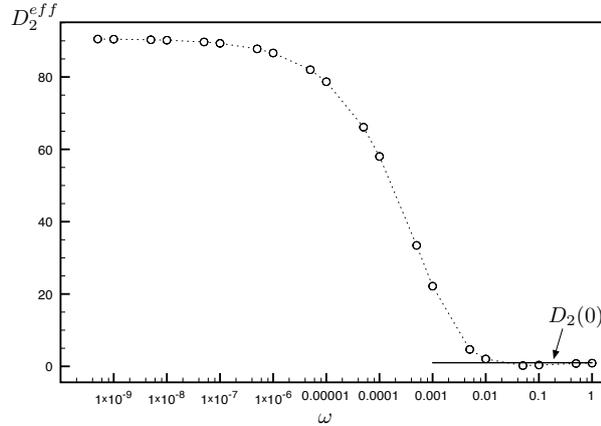


FIG. 3.3. Evolution of D_2^{eff} with respect to ω , for $D_2(x) = (1 + 3x)^{4/3}$.

$\omega_{min}(s^{-1})$	1	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}
$\omega_{max}(s^{-1})$	10	1	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	10^{-4}
$D_2^{eff}(m^2.s^{-1})$	2.5	14.5	54.5	62	62	62

TABLE 3.1

Numerical values of D_2^{eff} for various ranges of temporal frequencies.

The expression of $D_2^{eff}(\omega)$ is given by (2.22). Values for $D_2^{eff}(\omega)$ are represented on figure 3.3. First we clearly see that the use of constant values (typically the surface values) to perform the convergence study in the case of spatially variable coefficients is not a reasonable assumption here, since the effective diffusion coefficient significantly differs from $D_2(0)$. For high temporal frequencies, we can consider $D_2(0) \approx D_2^{eff}(\omega)$. However this equality is far from being satisfied for low frequencies.

In order to validate this purely analytical result, we have to check it numerically. Let us discretize the one dimensional model problem using the finite difference approach described in §3.1 with $D_2(x) = (1 + 3x)^{4/3}$. The strategy to compute numerically the effective value of $D_2(x)$ is to consider a tunable value for the constant coefficient D_1 . We start from a very small value of D_1 which results in a divergent algorithm because $\rho_{DN}^{var} = \sqrt{\frac{D_2^{eff}(\omega)}{D_1}} \geq 1$. Then we increase D_1 until reaching a value for which the algorithm becomes convergent, which means that D_1 attained the value of $D_2^{eff}(\omega)$. The results are shown in table 3.1, in which the ratio $\omega_{max}/\omega_{min}$ is kept constant and equal to 10. They are consistent with our analytical study, as for high frequencies the value of $D_2^{eff}(\omega)$ has the same order of magnitude than $D_2(0)$ ($D_2(0) = 1$, $D_2^{eff}(\omega) = 2.5$). On the contrary for low frequencies the effective value increases until reaching a threshold at $D_2^{eff} = 62$. A quite similar result is represented on figure 3.4: the value of ω_{max} is kept constant while ω_{min} varies and the same kind of behaviour is observed.

It should be noted that our validation is only qualitative and not quantitative. Indeed our discretized problem is not supposed to contain the same eigenvalues and eigenfunctions as those determined in the case of a continuous problem in our analytical study. On top of that our theoretical work carries a certain amount of assumptions concern-

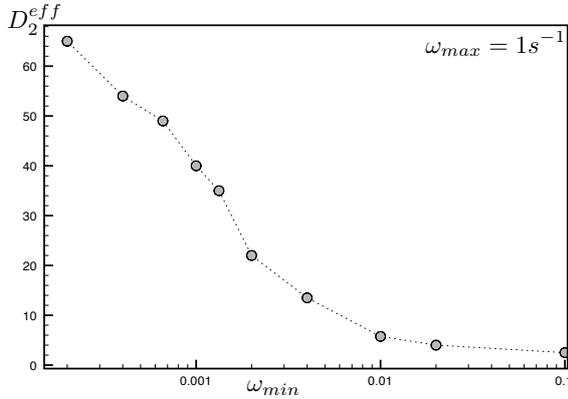


FIG. 3.4. Evolution of D_2^{eff} with respect to ω_{min} . For this numerical study ω_{max} is kept constant and ω_{min} varies to cover a wide range of temporal frequencies.

ω_{min}	ω_{max}	number of iterations		
		(cst)	(eff)	(var)
10^{-1}	1	7	7	6
10^{-2}	10^{-1}	7	7	7
10^{-3}	10^{-2}	7	5	6
10^{-4}	10^{-3}	8	4	6
10^{-5}	10^{-4}	9	5	7
10^{-6}	10^{-5}	14	6	9

TABLE 3.2

Number of iterations to reach a tolerance of 10^{-4} (the convergence criteria is defined as the \mathcal{L}^2 -norm of the difference between two successive iterates), with $L_1 = L_2 = 100m$ and 100 points in each subdomain. Different kinds of optimal parameters corresponding to different kinds of optimization are considered. (cst) and (eff) correspond to an optimization with constant coefficients respectively with the interface values and with the effective values, and (var) is the result of the optimization for variable coefficients.

ing the shape of the error function because we considered $T \rightarrow \infty$ and $L_j \rightarrow \infty$.

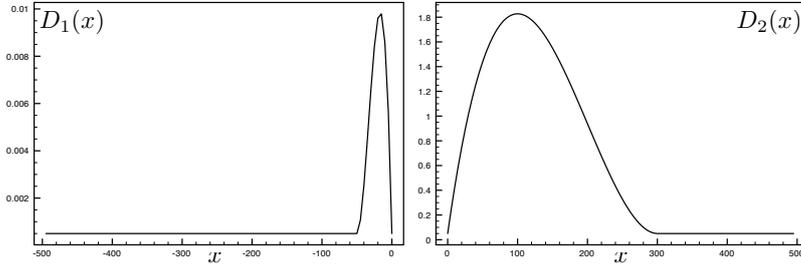
Let us consider now the same kind of study but with *Robin-Robin* interface conditions (see §2.3). First we propose to check if the effective values found (numerically) in table 3.1 in the *Dirichlet-Neumann* case are still valid for a *Robin-Robin* case. Note that those effective values may not be appropriate with Robin conditions because they have been determined with Dirichlet or Neumann type boundary conditions. We therefore compute $p_1^{*,cst}$ and $p_2^{*,cst}$ which are solutions of (1.8) with $\rho = \rho_{RR}^{cst}$ and $D_2 = D_2(0)$. Similarly we compute $p_1^{*,eff}$ and $p_2^{*,eff}$ solutions of the minmax problem with $D_2 = D_2^{eff}$. Both optimization problems corresponding to the determination of $p_j^{*,cst}$ and $p_j^{*,eff}$ have an analytical solution given in [8]. The results in table 3.2 show that the effective values found in a *Dirichlet-Neumann* case are still relevant. This suggests that, for our configuration, the eigenvalue problem (2.6) is not very sensitive to the type of boundary condition at $x = 0$. For low frequencies the convergence speed is significantly improved with the effective value due to the fact that D_j^{eff} significantly differ from $D_j(0)$. For this configuration we have also computed numerically the optimal parameters $p_1^{*,var}$ and $p_2^{*,var}$ solution of (1.8) with $\rho = \rho_{RR}^{var}$. The set of

eigenvalues and eigenfunctions solution of (2.6), required to compute ρ_{RR}^{var} , is determined thanks to a simple matrix method based on the finite difference scheme (3.1). The convergence speed obtained with $p_1^{*,var}$ and $p_2^{*,var}$ is substantially the same than the one with effective values, which is an interesting feature for our approach. While the convergence speed deteriorates with low temporal frequencies when considering an optimisation with $D_2(x) = D_2(0)$ we robustly keep a fast convergence by taking into account the variability of the coefficients. Note that the effective values have been numerically found, these values have therefore been determined on the "true" frequency spectra $[\omega_{min}^*, \omega_{max}^*]$ of the simulation. In the same time the $p_1^{*,var}$ and $p_2^{*,var}$ values are the solution of an optimisation problem on a theoretical frequency spectra $[\omega_{min} = \frac{\pi}{\Delta t}, \omega_{max} = \frac{\pi}{T}]$ which may be quite different from $[\omega_{min}^*, \omega_{max}^*]$. The parameters $p_1^{*,eff}$ and $p_2^{*,eff}$ are the result of an optimisation on diffusion coefficients that are representative of the computational code whereas $p_1^{*,var}$ and $p_2^{*,var}$ are the result of an optimisation on diffusion coefficients coming from a continuous analysis. This is an explanation of the fact that the convergence is always faster with effective values.

3.3. Testcase # 2: parabolic diffusion profiles. In the previous section we have considered a configuration with a constant diffusion coefficient on Ω_1 and a quasi-linear diffusion profile on Ω_2 . We propose now to investigate a more realistic case, in which the spatial variability of the diffusion coefficients is typical of a fluid with a turbulent boundary layer. This kind of profile is fully described in [13] and [7] for example. By evading all the physical details we can consider

$$(3.4) \quad D_j(x) = A_j x \left(1 - \frac{x}{h_{bl,j}} \right)^2 + \kappa_j \quad x \in [0, h_{bl,j}]$$

where $h_{bl,j}$ is the size of the boundary layer. Outside this boundary layer, i.e. for $x > h_{bl,j}$, the profile is constant and equal to κ_j (Note that we have a C^1 continuity at $x = h_{bl,j}$ between the parabolic profile and the constant value). The terms A_j are constant values. We set $\kappa_1 = 0.0005m^2.s^{-1}$, $\kappa_2 = 0.05m^2.s^{-1}$, $h_{bl,1} = 50m$, $h_{bl,2} = 300m$, $A_1 = 0.004m.s^{-1}$, $A_2 = 0.04m.s^{-1}$, those values are chosen to be as representative as possible for real configurations in the oceanic and atmospheric context. The corresponding profiles are represented on figure 3.5. For our testcase we choose $L_1 = L_2 = 500m$ and $dx_1 = dx_2 = 5$. Note that in practice the diffusion profile varies with respect to the surface fluxes (involved in the computation of $h_{bl,j}$) and to the distance from the interface. We consider here that the boundary layer size is constant by neglecting the impact of the surface flux on the diffusion profile, therefore the latter varies only with respect to x . We propose to study this testcase on various ranges of temporal frequencies. The corresponding convergence results are described in table 3.3. We have investigated different kind of Robin parameters, namely $p_1^{*,cst}$ and $p_2^{*,cst}$ for (cst) and $p_1^{*,var}$ and $p_2^{*,var}$ for (var). It is relatively surprising and unusual to realize that the convergence is faster for low frequencies. To explain this, it is useful to have a look at the effective values associated to $D_j(x)$. We implement the same strategy as the one proposed in §3.2 to compute numerically the effective values by mean of a *Dirichlet-Neumann* algorithm. These effective values are shown in table 3.4. Let us define the ratio $\gamma^{cst} = \frac{D_2(0)}{D_1(0)}$ corresponding to the jump between the diffusion coefficients at the interface. In our testcase we have $\gamma^{cst} = \frac{0.05}{0.0005} = 100$. This quantity is particularly interesting since it has a direct impact on the convergence speed. Following the results of [8] we know that the convergence speed is improving

FIG. 3.5. Evolution of D_2 and D_1 with respect to x .

ω_{min}	ω_{max}	number of iterations	
		(cst)	(var)
10^{-2}	10^{-1}	10	8
10^{-3}	10^{-1}	9	6
10^{-4}	10^{-1}	8	6
10^{-3}	10^{-2}	7	6
10^{-4}	10^{-2}	7	6
10^{-5}	10^{-2}	6	6
10^{-5}	10^{-4}	5	5
10^{-6}	10^{-4}	6	5
10^{-7}	10^{-4}	6	6

TABLE 3.3

Number of iterations to reach a tolerance of 10^{-4}

when γ^{cst} is increasing, i.e. $\rho_{RR}^{cst} \rightarrow 0$ when $\gamma^{cst} \rightarrow \infty$. In table 3.4 we see that γ^{eff} is larger than γ^{cst} for a wide range of temporal frequencies. This means that the spatial variability of the diffusion coefficients tends to improve the convergence speed of the associated algorithm. Indeed this acts to increase the discontinuity at the interface especially for low frequencies. The deterioration of the convergence due to low temporal frequencies is compensated by an increasing jump of the effective values at the interface. Moreover we see that for small values of the interface coefficient, $D_1(0)$ here, the effective value $D_1^{eff}(\omega)$ remains close to $D_1(0)$. This is consistent with formulae (2.22) and this is due to the term $e^{-\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}}x}$ which is extremely small for $D_1(0)$ small.

Concerning the optimization of ρ_{RR}^{var} it is interesting to see that it always performs at least as well as the optimisation of ρ_{RR}^{cst} . This shows that the optimisation tends to correct the values $p_1^{*,cst}$ and $p_2^{*,cst}$, used as first guesses of the numerical optimization, in a proper way.

4. Conclusion. We presented and analyzed in this paper a new approach to study the convergence of a global-in-time Schwarz algorithm in the case of a 1-D diffusion equation with variable coefficients. We showed that, thanks to our formulation, we are able to have a better understanding of the behaviour of the convergence factor. We exhibited some interesting features that were not shown by usual convergence studies with constant diffusion coefficients. We put particular emphasis on the fact that for low temporal frequencies it can be a strong (and irrelevant) assumption to

ω_{min}	ω_{max}	effective values		
		D_1^{eff}	D_2^{eff}	γ^{eff}
10^{-2}	10^{-1}	0.00051	0.051	100
10^{-3}	10^{-1}	0.00051	0.056	110
10^{-4}	10^{-1}	0.00055	0.11	200
10^{-3}	10^{-2}	0.00051	0.065	127
10^{-4}	10^{-2}	0.00052	0.1	192
10^{-5}	10^{-2}	0.0006	0.3	500
10^{-5}	10^{-4}	0.00075	0.4	533
10^{-6}	10^{-4}	0.0015	0.5	333
10^{-7}	10^{-4}	0.0025	0.7	280

TABLE 3.4

Effective values of $D_1(x)$ and $D_2(x)$ and their ratio $\gamma^{eff} = D_2^{eff}/D_1^{eff}$.

assimilate a variable diffusion coefficient to its constant interface value. Moreover we also showed that the variability of the coefficients can have a positive feedback on the convergence speed by increasing the discontinuity at the interface.

However the formulae we got involve the computation of a set of eigenvalues and associated eigenfunctions which makes it "uncomfortable" to use in practice. On top of that the use of a numerical resolution of the minmax problem seems mandatory because the expression of the convergence factor is complex and prevents from an analytical resolution of the optimisation problem. To become attractive for practical applications our approach must be complemented to provide effective values independent of the eigenvalues and the eigenfunctions. This could be possible by performing an accurate study of the eigenvalues problems to improve our knowledge of the behaviour of the eigenvalues with respect to the diffusion profiles variations. An alternative could also be to proceed to an offline calculation of a set of effective values associated to a given family of relevant diffusion profiles and to pick in this set during the online computation.

REFERENCES

- [1] P. B. BAILEY, W. N. EVERITT, A. ZETTL, *Regular and singular Sturm-Liouville problems with coupled boundary conditions*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh, 126A, 505-514, 1996.
- [2] O. DUBOIS, *Optimized schwarz methods for the advection-diffusion equation and for problems with discontinuous coefficients*, Ph.D. thesis, McGill University, 2007.
- [3] V. W. EKMAN, *On the influence of the earth's rotation on ocean currents*, Arch. Math. Astron. Phys., 2, 1-52, 1905.
- [4] B. ENQUIST AND A. MAJDA, *Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves*, Math. Comp., Vol. 31, pages 629-651, 1977.
- [5] M. J. GANDER AND L. HALPERN, *Optimized schwarz waveform relaxation for advection reaction diffusion problems*, SIAM Journal on Numerical Analysis, 45(2):666-697, 2007.
- [6] Q. KONG AND A. ZETTL, *Eigenvalues of regular Sturm-Liouville problems*, J. Differential Equations, v. 131, no.1, 1-19, 1996.
- [7] W. G. LARGE, J. C. MCWILLIAMS AND S. C. DONEY, *Oceanic Vertical Mixing: A Review and a Model with a Nonlocal Boundary Layer Parameterization*, Reviews of Geophysics, Vol. 32, no. 4, pages 363-403, 1994.
- [8] F. LEMARIÉ, L. DEBREU AND E. BLAYO, *Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 1 : the constant coefficients case*, Submitted to SIAM J. Sci. Comput., 2008.
- [9] P.L. LIONS, *On the schwarz alternating method iii: a variant for nonoverlapping subdomains*, In Tony F. Chan, Roland Glowinski, Jacques Périaux, et Olof Widlund, Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, held in Houston, Texas, March 20-22, 1990.

- [10] F. NATAF, F. ROGIER AND E. DE STURLER, *Optimal interface conditions for domain decomposition methods*, Tech. Rep. 301, CMAP (Ecole Polytechnique), 1994.
- [11] N. PERLIN, E. D. SKYLLINGSTAD, R. M. SAMELSON AND P. L. BARBOUR, *Numerical simulation of air-sea coupling during coastal upwelling*, Journal of Physical Oceanography, vol. 37, 2007.
- [12] A. QUARTERONI AND A. VALLI, *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, Oxford Science Publications, 1999
- [13] TROEN, I. AND L. MAHRT, *A simple model of the atmospheric boundary layer: Sensitivity to surface evaporation*, Bound.-Layer Meteorol., 37, 129-148, 1986.

Appendix A. Determination of the convergence rate in the case of variable coefficients. We recall (2.27):

$$(A.1) \quad \rho = |[(p_1 + p_2)\mathcal{K}_1 - 1] [(p_1 + p_2)\mathcal{K}_2 - 1] |$$

with

$$\begin{cases} \mathcal{K}_1 &= \left(1 - \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} \Phi_{n,1}(0)}{i\omega + \lambda_{n,1}^2} \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} x\right) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} dx \right) \frac{1}{p_1 + \sqrt{i\omega D_1(0)}} \\ \mathcal{K}_2 &= \left(1 + \sum_n \frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}} \Phi_{n,2}(0)}{i\omega + \lambda_{n,2}^2} \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}} x\right) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} dx \right) \frac{1}{p_2 + \sqrt{i\omega D_2(0)}} \end{cases}$$

(A.1) can be rewritten as:

$$(A.2) \quad \rho = \sqrt{\left(\mathcal{I}m(\mathcal{K}_1)^2(p_1 + p_2)^2 + [(p_1 + p_2)\mathcal{R}e(\mathcal{K}_1) - 1]^2\right) \left(\mathcal{I}m(\mathcal{K}_2)^2(p_1 + p_2)^2 + [(p_1 + p_2)\mathcal{R}e(\mathcal{K}_2) - 1]^2\right)}$$

In order to determine the real and imaginary parts of \mathcal{K}_1 and \mathcal{K}_2 , we can decompose each term appearing in the preceding expressions:

- $a_j = \mathcal{R}e\left(\frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_j(0)}}}{i\omega + \lambda_{n,j}^2}\right) = \sqrt{\frac{\omega}{2D_j(0)}} \left(\frac{\lambda_{n,j}^2 + \omega}{\omega^2 + \lambda_{n,j}^4}\right)$
- $b_j = \mathcal{I}m\left(\frac{\sqrt{\frac{i\omega}{D_j(0)}}}{i\omega + \lambda_{n,j}^2}\right) = \sqrt{\frac{\omega}{2D_j(0)}} \left(\frac{\lambda_{n,j}^2 - \omega}{\omega^2 + \lambda_{n,j}^4}\right)$
- $c_1 = \mathcal{R}e\left(\exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} x\right)\right) = \cos\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_1(0)}} x\right) \exp\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_1(0)}} x\right)$
- $d_1 = \mathcal{I}m\left(\exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{D_1(0)}} x\right)\right) = \sin\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_1(0)}} x\right) \exp\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_1(0)}} x\right)$
- $c_2 = \mathcal{R}e\left(\exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}} x\right)\right) = \cos\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_2(0)}} x\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{\omega}{2D_2(0)}} x\right)$
- $d_2 = \mathcal{I}m\left(\exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{D_2(0)}} x\right)\right) = -\sin\left(\sqrt{\frac{\omega}{2D_2(0)}} x\right) \exp\left(-\sqrt{\frac{\omega}{2D_2(0)}} x\right)$
- $e_j = \mathcal{R}e\left(\frac{1}{p_j + \sqrt{i\omega D_j(0)}}\right) = \frac{p_j + \sqrt{\frac{D_j(0)\omega}{2}}}{p_j^2 + D_j(0)\omega + p_j \sqrt{2D_j(0)\omega}}$

$$\bullet f_j = \mathcal{I}m \left(\frac{1}{p_j + \sqrt{i\omega D_j(0)}} \right) = - \frac{\sqrt{\frac{D_j(0)\omega}{2}}}{p_j^2 + D_j(0)\omega + p_j \sqrt{2D_j(0)\omega}}$$

Thanks to these equalities we can recast \mathcal{K}_j in the following form:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 &= (e_1 + if_1) \left(1 - \sum_n (a_1 + ib_1) \Phi_{n,1}(0) \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} (c_1(x) + id_1(x)) dx \right) \\ \mathcal{K}_2 &= (e_2 + if_2) \left(1 + \sum_n (a_2 + ib_2) \Phi_{n,2}(0) \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} (c_2(x) + id_2(x)) dx \right) \end{aligned}$$

and by noting

$$\begin{aligned} g_1 &= \sum_n \left[a_1 \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} c_1(x) dx - b_1 \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} d_1(x) dx \right] \Phi_{n,1}(0) \\ h_1 &= \sum_n \left[b_1 \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} c_1(x) dx + a_1 \int_{-L_1}^0 \tilde{D}_1(x) \frac{d\Phi_{n,1}}{dx} d_1(x) dx \right] \Phi_{n,1}(0) \\ g_2 &= \sum_n \left[a_2 \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} c_2(x) dx - b_2 \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} d_2(x) dx \right] \Phi_{n,2}(0) \\ h_2 &= \sum_n \left[b_2 \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} c_2(x) dx + a_2 \int_0^{L_2} \tilde{D}_2(x) \frac{d\Phi_{n,2}}{dx} d_2(x) dx \right] \Phi_{n,2}(0) \end{aligned}$$

we obtain

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 &= (e_1(1 - g_1) + f_1 h_1) + i(f_1(1 - g_1) - e_1 h_1) \\ \mathcal{K}_2 &= (e_2(1 + g_2) - f_2 h_2) + i(f_2(1 + g_2) + e_2 h_2) \end{aligned}$$

Hence the convergence factor ρ thanks to (A.2).

Discussion

Cette seconde partie du manuscrit nous a permis d'obtenir un certain nombre de résultats intéressants concernant les propriétés de convergence des algorithmes de Schwarz. Notre démarche a été orientée vers l'évaluation d'une partie des hypothèses communément effectuées.

Tout d'abord nous avons pu vérifier sur un cas simplifié à coefficients constants le comportement traditionnellement observé de l'algorithme de Schwarz : faible vitesse de convergence pour des basses fréquences temporelles et lorsque le saut des coefficients de diffusion est faible à l'interface. Ce dernier point n'est a priori pas un facteur limitant dans le cadre du couplage océan-atmosphère car le saut à l'interface entre les coefficients de diffusion turbulente est a priori important. Notre étude a permis de déterminer analytiquement un algorithme de vitesse de convergence optimale en montrant que le facteur de convergence optimisé satisfait une propriété d'équioscillation.

Nous avons ensuite pu valider, avec les grandeurs caractéristiques rencontrées dans le cadre du couplage océan-atmosphère, l'hypothèse qui consiste à considérer lors de l'étude théorique des sous-domaines de taille infinie. Cela permet d'affirmer que la convergence sera a priori indépendante du type de conditions limites imposées au fond de l'océan et sur le toit du modèle d'atmosphère.

L'hypothèse qui nous semblait la plus forte au départ était de supposer des coefficients de diffusion constants. Pour étudier spécifiquement l'effet de la variabilité spatiale de ces coefficients sur la vitesse de convergence nous avons introduit une approche nouvelle de détermination analytique de l'évolution des erreurs de l'algorithme. Grâce à cela nous avons montré que la variabilité verticale des coefficients (au moins lorsque celle-ci est parabolique) avait pour effet d'accélérer la convergence de la méthode pour les basses fréquences. Cette propriété est particulièrement intéressante car elle peut rendre la vitesse de convergence de l'algorithme faiblement dépendante de la valeur de ω_{min} .

Enfin nous avons introduit de manière succincte une méthodologie basée sur une approche par contrôle optimal qui nous semble prometteuse. Celle-ci permet de déterminer dans un cas donné les paramètres de Robin optimaux directement à partir de la discrétisation du problème considéré. Cela rend possible la comparaison des paramètres déterminés analytiquement sur un problème continu avec les "vrais" paramètres optimaux vis à vis du code informatique de résolution utilisé.

Discussion

Pour la problématique générale de cette thèse les résultats théoriques obtenus dans cette partie permettent d'envisager avec optimisme des applications concrètes de type océan-atmosphère. En effet la discontinuité des coefficients de diffusion à l'interface air-mer est très marquée et la variabilité verticale de ces coefficients est importante. D'après notre étude ces deux facteurs permettent en pratique d'espérer une convergence rapide de l'algorithme.

Troisième partie

Algorithme de Schwarz dans le contexte du couplage océan-atmosphère

La troisième partie de ce manuscrit est axée sur le couplage océan-atmosphère et la mise en place pratique de l'algorithme de Schwarz dans ce contexte. Pour cela nous exploitons les éléments introduits dans les deux premières parties. Dans un premier temps, dans le chapitre 5, nous verrons qu'il est très complexe d'écrire le problème de couplage océan-atmosphère sous la forme d'un algorithme de type Robin-Robin à cause des fonctions de paramétrisation. Nous montrerons en quoi ce problème est différent des problèmes "classiques" de couplage généralement rencontrés. Nous ne chercherons donc pas à optimiser la convergence de l'algorithme mais nous proposerons quelques pistes en ce sens. Enfin, nous verrons les principaux défauts des algorithmes usuels de couplage et nous comparerons leurs propriétés avec celles de l'algorithme de Schwarz. Ce que nous entendons par "méthodes usuelles" ce sont les algorithmes de couplage utilisés actuellement par la communauté des physiciens, à savoir les algorithmes de couplage au niveau du pas de temps des modèles et les algorithmes de couplage par fenêtre de temps sur lesquelles des flux moyens sont échangés.

Ensuite, dans le chapitre 6, nous décrirons le cheminement permettant de procéder à la mise en place de l'algorithme de Schwarz (non optimisé) pour le couplage de modèles réalistes. Du fait de l'incertitude sur les paramétrisations on ne peut pas affirmer que le processus itératif converge bien vers la solution exacte du problème mais nous verrons que certains défauts des algorithmes usuels peuvent être corrigés. Cette mise en place passe par l'étude théorique de convergence de l'algorithme en considérant une physique simplifiée. Une fois la convergence théorique montrée, nous aborderons les problèmes de l'initialisation et de la gestion des non-conformités en espace qui sont indispensables pour passer du problème continu au problème discret. Finalement la mise en oeuvre informatique est effectuée pour la simulation d'un cyclone tropical et les résultats physiques sont présentés. Les différentes considérations et résultats physiques de cette partie sont partiellement repris dans Lemarié *et al.* (2008c).



5

Méthodes usuelles de couplage océan-atmosphère

Sommaire

5.1	Cadre général	146
5.2	Flux moyens vs flux instantanés	151
5.3	Méthodes <i>ad-hoc</i>	151
5.3.1	Couplage <i>one-way</i>	153
5.3.2	Couplage <i>two-way</i>	153
5.4	Algorithme de Schwarz pour le couplage océan-atmosphère . .	159

Nous avons introduit dans la partie 2 de ce manuscrit un algorithme qui nous semble pertinent dans le cadre du couplage océan-atmosphère. Nous proposons ici, dans un premier temps, de faire le lien entre notre étude théorique et le problème que l'on souhaite résoudre en pratique. Nous verrons qu'à cause des paramétrisations de couche limite, il reste très complexe d'aborder le "vrai" problème de couplage. Nous poserons le problème approché à résoudre, qui revient à imposer l'égalité des flux (calculés par des paramétrisations) à l'interface air-mer. Ce problème correspond en pratique à celui qui est résolu lorsque que l'on couple des modèles réalistes. Nous discuterons ensuite des méthodes couramment utilisées actuellement pour aborder ce type de couplage. Il est intéressant de remarquer que ces méthodes *ad-hoc* peuvent s'exprimer dans le formalisme de l'algorithme de Schwarz. On sera donc en mesure d'évaluer les forces et les faiblesses de chacune des approches algorithmiques proposées. Nous considérerons ici uniquement les méthodes utilisées pour coupler des modèles

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

réalistes meso-échelles ou globaux, en excluant celles proposées dans des cadres simplifiés ou purement théoriques. Nous verrons enfin comment l'algorithme de Schwarz peut pallier certains problèmes liés à l'utilisation de méthodes *ad-hoc*.

5.1 Cadre général

Dans la suite, nous allons symboliquement représenter les modèles de circulation océanique ou atmosphérique par des opérateurs aux dérivées partielles \mathcal{L}_{oce} et \mathcal{L}_{atm} . Ces opérateurs correspondent aux équations primitives de l'océan et aux équations d'Euler pour l'atmosphère. En reprenant les notations introduites au §2.5, on définit par Ω_{oce} et Ω_{atm} les domaines de calcul respectifs. L'intégration des modèles sur une période de temps $[0, T]$ s'écrira

$$\mathcal{L}_{\text{oce}}u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}} \quad \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [0, T] \quad \mathcal{L}_{\text{atm}}u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}} \quad \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [0, T] \quad (5.1)$$

avec des conditions initiales et aux bords appropriées. u_{oce} et u_{atm} sont des vecteurs des variables d'état (vitesses, températures, ...), f_{oce} et f_{atm} sont des termes de forçage. Les deux domaines de calcul Ω_{oce} et Ω_{atm} ont une interface commune, notée Γ . Notre objectif est d'assurer la consistance de la solution du problème couplé de part et d'autre de l'interface Γ . Si on définit les opérateurs différentiels $\mathcal{F}_{\text{atm}} = \rho_{\text{atm}}K_x^a \frac{\partial}{\partial z}$ et $\mathcal{F}_{\text{oce}} = \rho_{\text{oce}}K_x^o \frac{\partial}{\partial z}$ avec K_x^a et K_x^o les coefficients de diffusion turbulente pour la quantité de mouvement ($x = m$) ou pour les scalaires ($x = s$), la consistance correspondant à l'égalité des flux et à la continuité de la valeur s'écrit

$$\mathcal{F}_{\text{atm}}u_{\text{atm}}(0, t) = \mathcal{F}_{\text{oce}}u_{\text{oce}}(0, t) \quad u_{\text{atm}}(0, t) = u_{\text{oce}}(0, t) \quad (5.2)$$

Afin d'écrire la consistance requise de façon générique, on supposera que les capacités calorifiques de l'eau et de l'air sont incluses dans les diffusivités. Par analogie à l'étude menée dans la partie 2, les conditions de transmission correspondantes peuvent s'écrire sous la forme de conditions de type *Robin-Robin*

$$\begin{cases} (\mathcal{F}_{\text{atm}} + p_1\text{Id}) u_{\text{atm}}(0, t) = (\mathcal{F}_{\text{oce}} + p_1\text{Id}) u_{\text{oce}}(0, t) \\ (\mathcal{F}_{\text{oce}} + p_2\text{Id}) u_{\text{oce}}(0, t) = (\mathcal{F}_{\text{atm}} + p_2\text{Id}) u_{\text{atm}}(0, t) \end{cases} \quad (5.3)$$

Cette écriture des conditions de transmission suppose implicitement que les couches limites de part et d'autre de l'interface air-mer sont explicitement résolues. Nous avons vu dans la première partie de ce document que ceci n'est pas le cas et que les flux sont calculés

5.1 Cadre général

par l'intermédiaire d'une paramétrisation impliquant, entre autre, les valeurs des variables d'état "loin" de l'interface (en pratique aux premiers niveaux verticaux des modèles). Nous noterons ε_a (resp. ε_o) cette distance dans l'atmosphère (resp. l'océan), avec $\varepsilon_a > 0$ (resp. $\varepsilon_o > 0$). Afin d'introduire ces variables dans les conditions de transmission (5.3), on définit deux fonctions de paramétrisation F_a et F_o telles que

$$\begin{aligned} u_{\text{atm}}(0, t) &= u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t) - F_a(u_{\text{atm}}, \partial u_{\text{atm}}/\partial z) \\ u_{\text{oce}}(0, t) &= u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t) + F_o(u_{\text{oce}}, \partial u_{\text{oce}}/\partial z) \end{aligned} \quad (5.4)$$

Si on fait le parallèle avec un développement de Taylor de u_{atm} (resp. u_{oce}) autour de 0 on remarque que la fonction F_a (resp. F_o) est proportionnelle à $\partial u_{\text{atm}}/\partial z(0, t)$ (resp. $\partial u_{\text{oce}}/\partial z(0, t)$).

Pour la suite, on introduit la fonction F_{oa} correspondant à la fonction de paramétrisation des flux air-mer. Notons que cette fonction dépend non seulement de $u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t)$ et $u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)$ mais aussi des précipitations P , du flux solaire Q_S et du flux de rayonnement infrarouge $Q_{L\downarrow}$. (on pourra regrouper les deux flux radiatifs $Q_{L\downarrow}$ et Q_S en un unique terme \mathcal{R}). Dans (5.3) les flux sont donc donnés sous la forme

$$\begin{cases} \mathcal{F}_{\text{atm}} u_{\text{atm}}(0, t) &= F_{oa}(u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t), u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)) \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} u_{\text{oce}}(0, t) &= F_{oa}(u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t), u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)) \end{cases} \quad (5.5)$$

Si on considère uniquement les composantes turbulentes des flux, F_{oa} peut être explicitée sous la forme

$$F_{oa}(u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t), u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)) = C_x |\Delta \vec{U}| (u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t) - u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)) \quad (5.6)$$

où C_x est un coefficient d'échange dépendant notamment de la stabilité de la couche limite et $|\Delta \vec{U}| = |\vec{U}_{\text{atm}}(\varepsilon_a) - \vec{U}_{\text{oce}}(-\varepsilon_o)|$.

A partir des différents éléments introduits jusqu'à maintenant, les conditions de transmission (5.3) prenant en compte les paramétrisations physiques s'écrivent

$$\begin{cases} (\mathcal{F}_{\text{atm}} + p_1 \text{Id}) u_{\text{atm}}(0, t) &= C_x |\Delta \vec{U}| (u_{\text{atm}}(0, t) + F_a + F_o - u_{\text{oce}}(0, t)) + p_1 u_{\text{oce}}(0, t) \\ (\mathcal{F}_{\text{oce}} + p_2 \text{Id}) u_{\text{oce}}(0, t) &= C_x |\Delta \vec{U}| (u_{\text{atm}}(0, t) + F_a + F_o - u_{\text{oce}}(0, t)) + p_2 u_{\text{atm}}(0, t) \end{cases} \quad (5.7)$$

Du fait des fonctions de paramétrisation, il apparaît trop complexe de faire la liaison avec la théorie présentée précédemment. Tout d'abord, comme l'illustre la figure 5.1, nous pouvons remarquer que les échanges de conditions limites entre les deux sous-domaines considérés sont

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

faits d'une manière atypique lorsque l'on traite le problème de couplage océan-atmosphère. Dans la plupart des applications "usuelles", un sous-domaine donné calcule une valeur d'interface et/ou un flux de surface pour les sous-domaines voisins, et inversement. Dans le cadre du couplage océan-atmosphère chaque sous-domaine fournit sa valeur de surface et reçoit un flux. En ce sens on pourrait penser que l'algorithme est équivalent à un algorithme de type *Dirichlet-Neumann*. Cependant, si on se place du point de vue des deux systèmes d'équations en présence, ceux-ci sont forcés par des flux, ce qui correspond à un algorithme de type *Neumann-Neumann*. De plus, si on se penche sur la façon dont sont paramétrisés ces flux, cela suggère que les conditions limites échangées sont de type *Robin-Dirichlet*. Enfin les fonctions de paramétrisation F_o et F_a introduites précédemment ne sont que partiellement connues car elles supposent que l'on sache précisément paramétriser l'évolution de u_{atm} (resp. u_{oce}) dans la sous-couche visqueuse.

Pour pouvoir faire un lien clair avec la théorie, il faudrait expliciter de manière précise toutes les fonctions de paramétrisation en présence. La formulation des conditions de transmission ainsi déterminées permettrait d'avoir une idée de la nature exacte de l'algorithme. Une autre alternative serait de se passer de la paramétrisation de couche limite de surface en considérant, par exemple, un raffinement local de la résolution dans cette région comme cela est suggéré par Sullivan *et al.* (1996). Dans ce cas, on se replacerait dans le cadre d'un couplage "classique" au sens de la figure 5.1.

Dans ce document nous traitons le problème avec des conditions du type de (5.5), mais les deux pistes mentionnées précédemment constituent des pistes de recherche intéressantes à terme.

Notons que l'algorithme avec des conditions du type de (5.5) ne correspond pas strictement à un algorithme de type *Neumann-Neumann* du fait des paramétrisations sous-jacentes. En effet, en imposant l'égalité des flux on impose implicitement une relation fonctionnelle entre les valeurs $u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t)$ et $u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)$, cette relation étant donné par la paramétrisation de CLS. Ceci s'écrit concrètement comme un saut des valeurs à travers l'interface

$$u_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t) - u_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t) = \gamma_{CLS} \quad (5.8)$$

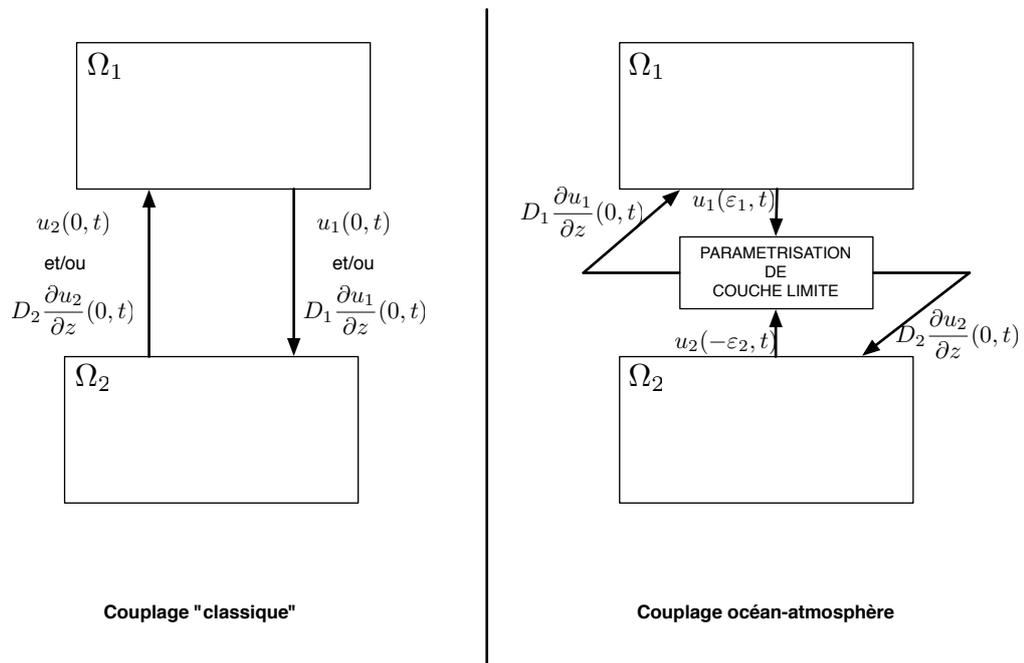


Fig. 5.1: Description des échanges de conditions limites dans le cas d'un couplage "classique" (i.e. sans passer par une fonction de paramétrisation) et dans le cas du couplage océan-atmosphère.

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

Problème de couplage abordé

Pour les raisons expliquées auparavant, nous garderons le problème de couplage exprimé sous sa forme (5.5) sans chercher à l'exprimer en terme de conditions de transmission connues (de type *Dirichlet-Neumann* ou *Robin-Robin*, par exemple). Le problème que l'on abordera sera donc le suivant :

$$\begin{cases} \text{Trouver } u_{\text{atm}} \text{ et } u_{\text{oce}} \text{ qui satisfont} \\ \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}}, & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [0, T] & \text{et} & \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}}, & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [0, T] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = F_{\text{oa}}(u_{\text{oce}}, u_{\text{atm}}, \mathcal{R}, P) & \text{sur } \Gamma \times [0, T] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = F_{\text{oa}}(u_{\text{oce}}, u_{\text{atm}}, \mathcal{R}, P) & \text{sur } \Gamma \times [0, T] \end{cases} \quad (5.9)$$

Nous précisons que la solution de ce problème n'est pas strictement la solution exacte du problème de couplage océan-atmosphère du fait des erreurs sur la paramétrisation, et rien ne permet de montrer qu'à convergence, la solution de ce problème est égale à la solution exacte donnée par (5.2). En pratique, c'est ce problème (5.9) qui est traditionnellement traité lors du couplage de modèles réalistes. Cependant, comme nous le montrerons par la suite, les algorithmes "usuels" n'en fournissent pas la solution exacte. Celle-ci devra vérifier l'égalité des flux de quantité de mouvement, de chaleur (nette) et d'eau douce. Dans la suite de ce chapitre, nous présentons les approches algorithmiques de couplage couramment utilisées en montrant leurs avantages et leurs défauts. Les algorithmes usuels se divisent en deux catégories : les algorithmes de couplage par fenêtres temporelles et les algorithmes de couplage au niveau du pas de temps. Dans un premier temps, nous présentons des algorithmes de couplage par fenêtres temporelles. Nous verrons qu'avec ce type d'algorithme les interactions entre les deux sous-domaines n'ont pas lieu à travers des valeurs instantanées des flux mais à travers des valeurs moyennées sur la fenêtre de temps. Les considérations physiques justifiant ce choix sont présentées dans le paragraphe suivant. Ensuite, pour les algorithmes de couplage au niveau du pas de temps des modèles, comme nous le verrons, il est possible que certains problèmes de stabilité numérique puissent survenir. Enfin nous préciserons comment pallier à ces problèmes grâce à l'algorithme de Schwarz.

5.2 Flux moyens vs flux instantanés

Les flux à l'interface air-mer correspondent à la somme de composantes turbulentes (calculées par les formules *bulk*) et de composantes radiatives calculées en partie dans le modèle d'atmosphère. Tout d'abord, nous avons vu précédemment que le calcul des flux turbulents peut être très incertain sur des échelles de temps petites (inférieures à la quinzaine de minutes) et que des flux moyens horaires sont donc plus pertinents. Ceci s'explique par le manque de connaissances précises et le manque d'observations directes des flux air-mer à hautes fréquences spatiales et temporelles. De plus, les coefficients d'échange (empiriques) impliqués dans le calcul *bulk* des flux sont calibrés à partir de mesures moyennées dans le temps (voir chapitre 2 pour de plus amples explications). Il y a également un certain nombre de petites échelles temporelles dans la couche limite atmosphérique qui ne sont pas pertinentes pour l'océan : la moyenne va donc agir comme un filtre sur ces échelles en supprimant la partie oscillante du signal.

En ce qui concerne les composantes radiatives des flux (essentiellement le flux solaire), l'incertitude peut également être importante. En effet, la couverture nuageuse est parfois représentée de manière incorrecte dans les modèles numériques, ce qui influe directement sur la précision du calcul du flux solaire incident à la surface de l'océan. Comme nous le voyons dans le tableau 5.1, de nombreuses variables sont utilisées pour le calcul de $Q_{S\downarrow}$, dont l'enneuagement. Plus généralement, plus le nombre de schémas de paramétrisation dans lequel une variable est impliquée est grand, plus l'incertitude sur la valeur de cette variable peut être jugée importante. Pour ces différentes raisons, on peut également choisir de moyenner le flux solaire dans le temps.

C'est avec ces considérations physiques à l'esprit que nous allons maintenant décrire les méthodes usuelles de couplage de modèles réalistes de l'océan et de l'atmosphère.

5.3 Méthodes *ad-hoc*

Les méthodes de couplage peuvent être séparées en deux catégories : les algorithmes *1-way*, lorsqu'un modèle reçoit des informations mais n'en envoie pas, et les algorithmes *2-way* lorsqu'un retour d'information existe (échange d'informations dans les 2 sens).

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

Schémas de paramétrisation		Rad	MP	PC	CLA	CLS
u_{atm}	vitesses			E	E/S	
	température potentielle	E/S	E/S	E/S	E/S	
	vapeur d'eau	E	E/S	E/S	E/S	
	nuages	E	E/S	S	E/S	
	précipitations	E	E/S	S		
F_{oa}	$Q_{L\uparrow}$	E				S
	$Q_{L\downarrow}$	S				E
	$Q_{S\uparrow}$	E				S
	$Q_{S\downarrow}$	S				E
	P		S			E
	Q_H				E	S
	Q_E				E	S
	$\vec{\tau}$				E	S

Tab. 5.1: Interactions physiques entre les différents schémas de paramétrisation. Rad correspond au schéma radiatif, MP au schéma de microphysique et PC à la paramétrisation des cumulus. On note par un **E** lorsque la quantité considérée est en entrée d'un schéma de paramétrisation et un **S** lorsqu'elle est en sortie.

5.3.1 Couplage *one-way*

Les algorithmes *1-way* correspondent à ce que l'on appelle un mode "forcé" et peuvent se définir par

$$\mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}} \quad \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [0, T]$$

puis

$$(5.10)$$

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}} & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [0, T] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = F_{\text{oa}}(u_{\text{oce}}, u_{\text{atm}}, \mathcal{R}, P) & \text{sur } \Gamma \times [0, T] \end{cases}$$

Pour ce type de stratégie de couplage, l'intégration du modèle atmosphérique est généralement effectuée *off-line*, à savoir que son intégration sur la période de temps $[0, T]$ est réalisée une fois pour toutes en amont. Cette intégration est généralement effectuée en utilisant un état de l'océan fourni par des données issues d'un modèle grande échelle. Lorsque ce type de stratégie est adoptée, soit le modèle d'océan est directement forcé par les flux atmosphériques (calculés en considérant un état de l'océan fourni par des données grande échelle), soit le modèle d'océan possède son propre schéma de paramétrisation de la couche limite de surface atmosphérique (i.e. ses propres formules *bulk*), et il utilisera donc dans ce cas les variables d'état du modèle d'atmosphère à son premier niveau vertical ainsi que les flux radiatifs de celui-ci. Cette seconde méthode est plus appropriée car elle permet de calculer les flux en prenant en compte l'état de l'océan fourni par son propre modèle.

Il est clair qu'avec un algorithme *one-way*, on ne traite pas le problème (5.9) mais un problème approché car u_{oce} n'agit pas sur u_{atm} . Dans certains cas, en océanographie par exemple, où l'on souhaite uniquement obtenir des forçages à haute résolution pour son modèle, ce type de couplage peut s'avérer satisfaisant (e.g. Muller *et al.*, 2007). Cependant, dès que l'on souhaite étudier des phénomènes complexes où les échanges énergétiques entre l'océan et l'atmosphère sont importants (e.g. pour les cyclones tropicaux ou des études climatiques), un couplage *2-way* est nécessaire.

5.3.2 Couplage *two-way*

En ce qui concerne les algorithmes *2-way*, les stratégies "habituelles" de couplage peuvent être trouvées, par exemple, dans Bryan *et al.* (1996) pour des applications globales grande échelle, et dans Perlin *et al.* (2007) ou Bao *et al.* (2000) pour des études régionales haute résolution. Nous verrons par la suite les différences (très importantes) entre ces deux types

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

d'approches conçues pour différents types d'applications. Notons aussi que les stratégies de couplage peuvent être différentes suivant les modèles numériques considérés. Concrètement on rencontre les trois cas suivants :

1. Les deux modèles considérés possèdent un schéma de paramétrisation de la couche limite de surface. Pour la consistance du couplage, les flux doivent être calculés de la même manière pour les deux modèles. Généralement on choisira d'utiliser le schéma de paramétrisation du modèle d'atmosphère et on forcera le modèle d'océan directement par des flux.
2. Aucun des deux modèles ne possède de schéma de paramétrisation de la CLS. Dans ce cas, il faut ajouter une formulation *bulk* au coupleur qui sera chargé de calculer les flux en plus d'assurer la synchronisation des échanges entre les modèles.
3. Seul le modèle d'atmosphère calcule les flux air-mer. Dans ce cas le modèle d'océan prend directement des flux en entrée, comme dans le cas 1.

On considérera dans la suite que le modèle d'océan est forcé par des flux qui sont calculés par le schéma de couche limite du modèle d'atmosphère. Ceci signifie que, lors de l'intégration sur $\Omega_{\text{oce}} \times [0, T]$, le flux ne peut pas être mis à jour en utilisant les valeurs de u_{oce} nouvellement calculées, car le modèle n'a pas accès au schéma de paramétrisation adéquat (cf figure 5.2).

Comme nous l'avons mentionné précédemment, lorsque l'on considère une interaction *two-way* entre l'océan et l'atmosphère, il y a principalement deux approches de résolution du problème de couplage qui ont été proposées. Celles-ci se différencient principalement par la fréquence de couplage entre les deux modèles.

Couplage par fenêtres temporelles (basé sur des flux moyens)

Typiquement, pour des problèmes à l'échelle globale, le temps total de simulation $[0, T]$ est découpé en N fenêtres de temps $[t_i, t_{i+1}]$ de taille plus réduite, i.e. $[0, T] = \cup_{i=1}^N [t_i, t_{i+1}]$. La taille de ces fenêtres est généralement de l'ordre de 1 heure à 1 jour, dépendant du type d'application et de la nécessité ou non de résoudre le cycle diurne. Dans ce cas, l'océan et l'atmosphère échangent sur chaque fenêtre de temps des flux moyennés en temps, pour les raisons évoquées dans le §5.2. En notant $\langle \cdot \rangle_i$ une moyenne temporelle sur une fenêtre de

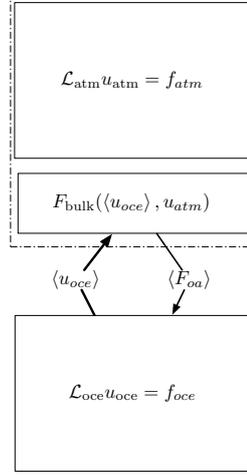


Fig. 5.2: Représentation schématique des échanges entre les modèles lorsque l'on considère un modèle d'atmosphère possédant un schéma de paramétrisation de couche limite. Le modèle d'océan fournit son état moyen $\langle u_{\text{oce}} \rangle$ directement au modèle d'atmosphère qui lui renvoie des flux moyens $\langle F_{\text{oa}} \rangle$.

temps $[t_i, t_{i+1}]$, l'algorithme de couplage, en mode asynchrone (i.e. les modèles ne sont pas intégrés en même temps), s'écrit

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}} & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} \mathbf{u}_{\text{atm}} = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}} \rangle_{i-1}, \mathbf{u}_{\text{atm}}(\mathbf{t}), \mathcal{R}, \mathbf{P}) & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases}$$

puis

(5.11)

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}} & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} \mathbf{u}_{\text{oce}} = \langle \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}} \rangle_{i-1}, \mathbf{u}_{\text{atm}}(\mathbf{t}), \mathcal{R}, \mathbf{P}) \rangle_i & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases}$$

Notons que $\langle \cdot \rangle_i$ peut soit correspondre à un flux moyen sur $[t_i, t_{i+1}]$, soit à une séquence de flux moyens sur la même période. Nous remarquons que c'est la valeur de u_{oce} sur la fenêtre de temps précédente qui est utilisée pour calculer les flux sur la fenêtre de temps courante. Les flux calculés sont donc "en retard" sur l'instant de simulation. L'opérateur $\langle \cdot \rangle_i$ peut simplement correspondre à une moyenne arithmétique ou bien à un calcul de moyenne plus évolué avec de meilleures propriétés spectrales.

Dans certains cas, suivant les types de calculateurs envisagés et la scalabilité des codes numériques, on peut vouloir effectuer l'intégration des deux modèles en parallèle, ce qui n'est

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

pas possible en mode asynchrone. L'algorithme synchrone correspondant, représenté sur la figure 5.3, est alors

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}} & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} \mathbf{u}_{\text{atm}} = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}} \rangle_{i-1}, \mathbf{u}_{\text{atm}}(\mathbf{t}), \mathcal{R}, \mathbf{P}) & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases}$$

(5.12)

pendant que

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}} & \text{in } \Omega_{\text{oce}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} \mathbf{u}_{\text{oce}} = \langle \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}} \rangle_{i-2}, \mathbf{u}_{\text{atm}}|_{i-1}, \mathcal{R}, \mathbf{P}) \rangle_{i-1} & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases}$$

En mode asynchrone, on remarque clairement que les deux modèles, sur une période de temps $[t_i, t_{i+1}]$, sont forcés par les mêmes flux moyens. En mode synchrone, ceci n'est plus vérifié car ce sont les flux moyens sur la fenêtre $[t_i, t_{i+1}]$ de l'océan et la fenêtre $[t_{i-1}, t_i]$ de l'atmosphère qui sont égaux. De plus, la valeur de u_{oce} utilisée dans la fenêtre courante provient cette fois-ci de l'avant-dernière fenêtre.

Pour des études climatiques, la longueur typique d'une fenêtre de temps est de 24 heures. Avec des algorithmes du type de (5.11) et (5.12), l'atmosphère résout le cycle diurne, au contraire de l'océan. En effet, \mathcal{R} est recalculé en fonction du temps pendant l'intégration du modèle d'atmosphère, mais est "gelé" pour le modèle d'océan. Ce problème peut être en partie résolu en multipliant le flux solaire moyen par une fonction sinusoïdale, comme proposé dans Danabasoglu *et al.* (2006).

Avec ce type d'approche algorithmique (synchrone ou asynchrone), on résout un problème proche de (5.9). Cependant, les deux modèles ne sont pas en équilibre exact sur $[t_i, t_{i+1}]$. En effet l'intégration du modèle d'océan sur cette période de temps modifiera u_{oce} . Cette modification n'est pas prise en compte par l'atmosphère sur le bon intervalle de temps $[t_i, t_{i+1}]$ mais seulement sur $[t_{i+1}, t_{i+2}]$.

L'utilisation de l'état moyen de l'océan sur la fenêtre de temps $i-1$ pour calculer le flux sur la fenêtre i peut être problématique. Lors de certains événements (de type *upwelling* côtier par exemple), des variations significatives de la température de surface de l'océan peuvent se produire sur des échelles de temps assez courtes. De plus, il peut être intéressant d'avoir une meilleure représentation du cycle diurne pour l'océan, sans passer par la multiplication d'un flux moyen par une fonction sinusoïdale. Ces deux problèmes peuvent être partiellement résolus en réduisant la taille des fenêtres de temps (ce qui en pratique revient à augmenter la fréquence de couplage).

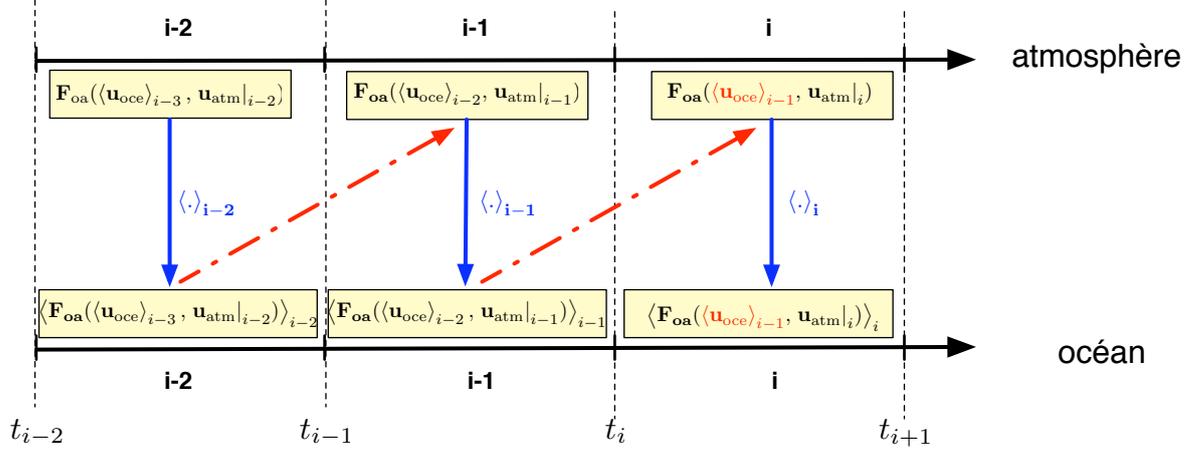


Fig. 5.3: Représentation schématique de la stratégie de couplage par fenêtres de temps en mode synchrone.

Couplage au niveau du pas de temps

Cependant un autre type d'approche algorithmique est généralement adoptée pour les études couplées à échelle régionale. Dans la réalité, l'océan et l'atmosphère échangent des flux de manière continue en temps. Il peut ainsi être considéré qu'une fréquence de couplage appropriée doit être la plus petite possible, typiquement de l'ordre du plus grand pas de temps entre celui du modèle d'atmosphère et celui du modèle d'océan. De ce point de vue, un algorithme pertinent consiste à échanger des flux instantanés. Supposons que le modèle d'océan ait un pas de temps Δt_o , et celui d'atmosphère un pas de temps Δt_a tel que $\Delta t_o = n\Delta t_a$. La valeur de n dépend des schémas de résolution en temps utilisés et de la résolution horizontale des modèles, une valeur typique étant de l'ordre de 25 à 100 (cf chapitre 1). L'algorithme correspondant peut s'écrire à l'échelle d'un pas de temps du modèle d'océan

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}} = f_{\text{atm}} & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [t_i, t_i + n\Delta t_a] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} \mathbf{u}_{\text{atm}} = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\mathbf{u}_{\text{oce}}(\mathbf{t}_i), \mathbf{u}_{\text{atm}}(\mathbf{t})) & \text{sur } \Gamma \times [t_i, t_i + n\Delta t_a] \end{cases} \quad (5.13)$$

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}} = f_{\text{oce}} & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [t_i, t_i + \Delta t_o] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} \mathbf{u}_{\text{oce}} = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\mathbf{u}_{\text{oce}}(\mathbf{t}_i), \mathbf{u}_{\text{atm}}(\mathbf{t}_i)) & \text{sur } \Gamma \times [t_i, t_i + \Delta t_o] \end{cases}$$

Typiquement, les composantes atmosphérique et océanique sont intégrées en temps sur une période $n\Delta t_a$ (ou identiquement Δt_o). Un échange de valeurs instantanées est ensuite réalisé,

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

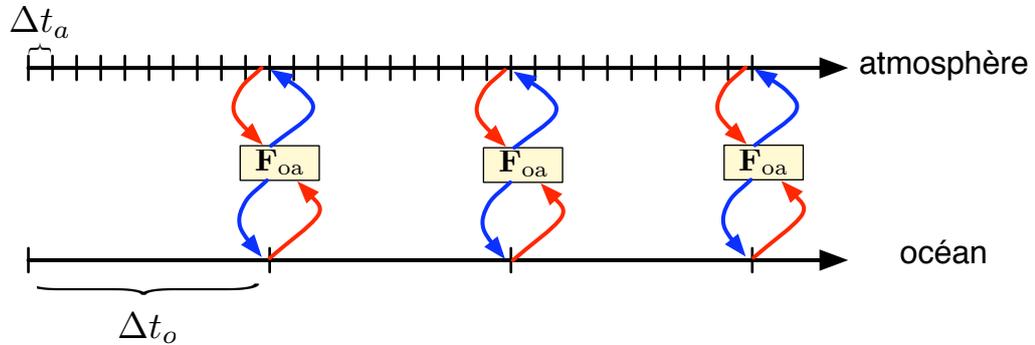


Fig. 5.4: Représentation schématique de la stratégie de couplage au niveau du pas de temps. Les flèches correspondent à un échange de conditions limites.

et l'intégration des modèles repart pour une nouvelle période de temps de longueur $n\Delta t_a$, ce procédé étant répété sur la durée totale de la simulation. La méthode de couplage est schématiquement représentée par la figure 5.4.

Nous pouvons formuler un certain nombre de remarques sur ce type de couplage. Tout d'abord, d'un point de vue informatique et numérique, ce type d'algorithme est délicat à mettre en oeuvre et peut engendrer des communications importantes et fréquentes entre les deux modèles.

Cette approche algorithmique du couplage est bien sûr plus proche de ce qui est fait en théorie dans d'autres domaines, mais nous pouvons nous interroger sur la pertinence physique de ce type d'approche où les modèles échangent des valeurs instantanées incertaines (cf §5.2). Cependant une alternative peut être d'ajouter des détails physiques importants (généralement négligés dans les formulations *bulk*), à savoir la contribution des embruns ou la couche limite due à la présence de vagues (*wavy boundary layer*) comme cela est proposé dans Bao *et al.* (2000). Dans ce cas, il est possible d'émettre l'hypothèse que l'incertitude des formules *bulk* (spécialement due à l'effet des vagues) décroît, et donc que des flux instantanés deviennent pertinents. Il n'a cependant pas encore été montré clairement que l'utilisation d'un modèle de vague améliore significativement la qualité des flux calculés.

Sur la figure 5.4 nous voyons que les flux sont échangés à un instant t entre les deux sous-domaines, en supposant un traitement explicite de ceux-ci. Or, en pratique, la diffusion verticale dans les modèles est traitée de manière implicite (voire semi-implicite) : c'est donc le flux à l'instant $t + \Delta t_a$ (resp. $t + \Delta t_o$) qui est requis. Le fait qu'il y ait, de manière

5.4 Algorithme de Schwarz pour le couplage océan-atmosphère

systematique, un décalage en temps peut nuire à la stabilité du schéma de couplage proposé car la condition de surface et les profils verticaux dans les modèles ne sont pas conservés synchrones. Une manière de résoudre ce problème serait d'utiliser un processus itératif à chaque pas de temps (Cai, 1991).

C'est en partant des constats faits dans cette section que nous avons souhaité envisager l'utilisation de l'algorithme de Schwarz global en temps.

5.4 Algorithme de Schwarz pour le couplage océan-atmosphère

On peut se référer à la partie 2 de ce manuscrit pour une description complète de l'algorithme de Schwarz. Ce type de méthode a notamment été récemment appliquée à la modélisation océanique dans le but d'améliorer la spécification des frontières ouvertes et les techniques de nesting (Blayo & Debreu, 2005, Cailleau *et al.*, 2008). Nous souhaitons ici le formuler dans le cadre du couplage océan-atmosphère. Avec les notations introduites précédemment, l'algorithme de Schwarz sur une fenêtre $[t_i, t_{i+1}]$ s'écrit

Boucle sur k jusqu'à convergence

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}}^k = f_{\text{atm}}, & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} \mathbf{u}_{\text{atm}}^k = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\mathbf{u}_{\text{oce}}^{k-1}, \mathbf{u}_{\text{atm}}^k, \mathcal{R}^k, \mathbf{P}^k) & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases} \quad (5.14)$$

puis

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}}^k = f_{\text{oce}}, & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} \mathbf{u}_{\text{oce}}^k = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\mathbf{u}_{\text{oce}}^{k-1}, \mathbf{u}_{\text{atm}}^k, \mathcal{R}^k, \mathbf{P}^k) & \text{sur } \Gamma \times [\mathbf{t}_i, \mathbf{t}_{i+1}] \end{cases}$$

où k est le numéro de l'itération. De plus u_{oce}^0 est requis sur Γ pour l'initialisation. Cet algorithme est écrit sous forme *multiplicative* (qui correspond au mode asynchrone mentionné auparavant). Si la condition $\mathcal{F}_{\text{oce}} u_{\text{oce}}^k = F_{\text{oa}}(u_{\text{oce}}^{k-1}, u_{\text{atm}}^k, \mathcal{R}^k, P^k)$ est remplacée par $\mathcal{F}_{\text{oce}} u_{\text{oce}}^k = F_{\text{oa}}(u_{\text{oce}}^{k-1}, u_{\text{atm}}^{k-1}, \mathcal{R}^{k-1}, P^{k-1})$, nous obtenons la forme *parallèle* (ou mode synchrone). Au contraire de l'algorithme (5.13), cet algorithme est faiblement dépendant des discrétisations en temps des deux modèles. Si l'on stocke la solution à chaque pas de temps, (5.13) est équivalent à une (et une seule) itération de (5.14). On peut également noter qu'en considérant $\Delta t_a = \Delta t_o$, (5.13) correspond à une unique itération de l'algorithme de Schwarz

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

local en temps. Dans le même ordre d'idée, si des flux moyens sont considérés, une (et une seule) itération de la forme *multiplicative* de (5.14) est équivalente à (5.11).

Le principal défaut de l'algorithme de Schwarz dans le cadre du couplage océan-atmosphère est le recours à un processus itératif. Le coût total de la méthode correspond au nombre d'itérations multiplié par le coût de chaque modèle, sachant que les modèles d'océan et surtout d'atmosphère ont un coût de calcul déjà élevé. C'est avec cette difficulté présente à l'esprit que nous avons mené l'étude détaillée des propriétés de convergence de l'algorithme de Schwarz présentée dans la partie 2.

On peut envisager quelques modifications à apporter à l'algorithme (5.14). Pour les considérations physiques évoquées précédemment dans le §5.2, on considérera des flux moyennés en temps. L'algorithme peut alors se réécrire :

Boucle sur k jusqu'à convergence

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{atm}} u_{\text{atm}}^k = f_{\text{atm}} & \text{sur } \Omega_{\text{atm}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{atm}} \mathbf{u}_{\text{atm}}^k = \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}}^{k-1} \rangle_i, \mathbf{u}_{\text{atm}}^k(\mathbf{t}), \mathcal{R}^k, \mathbf{P}^k) & \text{sur } \Gamma \times [t_i, t_{i+1}] \end{cases} \quad (5.15)$$

$$\begin{cases} \mathcal{L}_{\text{oce}} u_{\text{oce}}^k = f_{\text{oce}} & \text{sur } \Omega_{\text{oce}} \times [t_i, t_{i+1}] \\ \mathcal{F}_{\text{oce}} \mathbf{u}_{\text{oce}}^k = \langle \mathbf{F}_{\text{oa}}(\langle \mathbf{u}_{\text{oce}}^{k-1} \rangle_i, \mathbf{u}_{\text{atm}}^k(\mathbf{t}), \mathcal{R}^k, \mathbf{P}^k) \rangle_i & \text{sur } \Gamma \times [t_i, t_{i+1}] \end{cases}$$

A convergence de cet algorithme, les deux modèles sont forcés par des flux calculés avec des valeurs prises aux bons instants, contrairement à ce qui était fait dans l'algorithme (5.11). Là encore $\langle \cdot \rangle_i$ peut définir une séquence de flux horaires sur $[t_i, t_{i+1}]$. C'est ce type de configuration, schématiquement représentée sur la figure 5.5, que l'on étudiera plus loin dans ce manuscrit, dans le cadre d'une application numérique.

Dans ce chapitre nous avons établi le problème de couplage à résoudre en pratique. Nous avons ensuite montré que l'algorithme de Schwarz est tout à fait approprié pour la résolution de ce problème. Nous allons vérifier cela en pratique dans le chapitre 6.

5.4 Algorithme de Schwarz pour le couplage océan-atmosphère

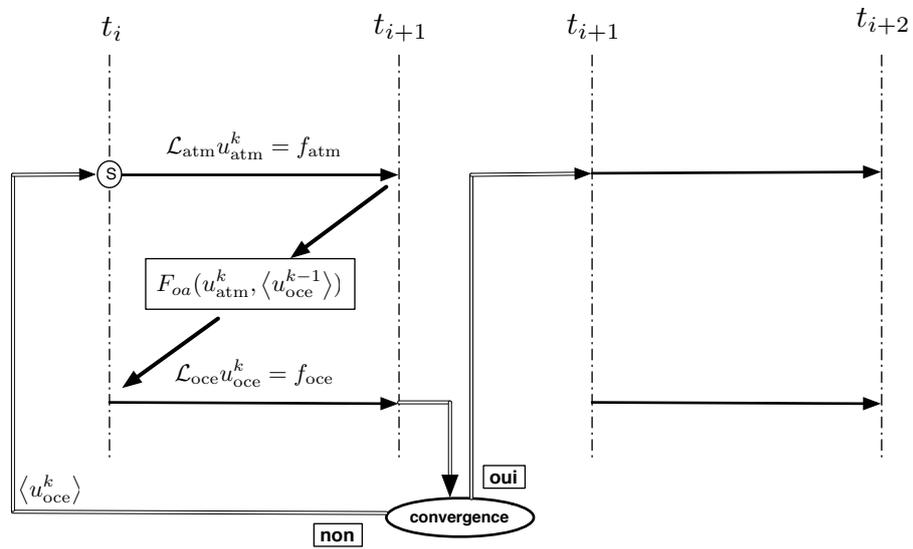


Fig. 5.5: Représentation schématique de la stratégie de couplage océan-atmosphère par méthode de Schwarz.

5. MÉTHODES USUELLES DE COUPLAGE OCÉAN-ATMOSPHERE

6

Vers un algorithme mathématiquement et physiquement consistant

Sommaire

6.1	Formulation du problème	164
6.2	Etude de convergence	167
6.3	Une application avec des modèles réalistes	169
6.3.1	Contexte	169
6.3.2	Modèles numériques	170
6.3.3	Initialisation des modèles couplés	170
6.3.4	Traitement des non-conformités en espace	173
6.3.5	Résultats physiques	176

Nous avons mis l'accent dans la première partie de ce document sur la nécessaire consistance entre les parties numériques et physiques à l'échelle des modèles. A l'échelle d'un problème couplé cette consistance doit également être vérifiée. Nous avons jusqu'à maintenant introduit une méthode intéressante du point de vue numérique, il faut cependant s'assurer de la consistance du couple paramétrisations physiques / méthode de Schwarz. Il n'y a pas eu, à notre connaissance, d'évaluation de la compatibilité entre les paramétrisations des couches limites atmosphériques et océaniques dans le cadre d'un problème couplé. En pratique ces deux types de paramétrisations ont été conçues et évaluées indépendamment

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

l'une de l'autre, et rien n'assure a priori de leur compatibilité. L'algorithme de Schwarz présente un cadre intéressant pour ce genre d'étude. Pour juger la compatibilité, on pourra mener une étude de convergence d'un algorithme incluant tout ou partie de la complexité physique du problème. On s'intéressera au couplage de deux équations de diffusion dont les coefficients de diffusion sont donnés par des paramétrisations de type *K-profile* et dont les flux sont calculés par l'intermédiaire de formules *bulk*.

Dans un premier temps, nous allons concilier les éléments des deux premières parties de ce document pour poser le problème complet incluant toute la complexité physique. Dans un second temps, nous émettrons quelques hypothèses simplificatrices afin de pouvoir calculer le taux de convergence de l'algorithme correspondant. Enfin, en nous basant sur cette étude, nous jugerons si nous pouvons nous attendre ou non à une convergence rapide de l'algorithme.

Une fois que nous aurons vérifié la convergence de l'algorithme, nous procéderons à une application de la méthode sur un cas réaliste. Pour ce faire, nous couplerons deux modèles numériques 3D très répandus dans la communauté océan-atmosphère : WRF et ROMS (dans sa version ROMS-AGRIF). Cette application sera effectuée dans le but de simuler la genèse et la propagation d'un cyclone tropical.

6.1 Formulation du problème

On reprend ici les notations du chapitre 5 et on considère

$$\mathcal{L}_{\text{atm}} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z^a(z) \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \mathcal{L}_{\text{oce}} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z^o(z) \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (6.1)$$

avec K_z^a et K_z^o les coefficients de diffusion turbulente dont la forme est donnée par des paramétrisations de couche limite (voir §2.4). On fait ici le choix d'étudier le cas des vitesses \vec{U}_{oce} et \vec{U}_{atm} . Ce choix s'explique principalement par deux raisons :

1. si on suppose des conditions de stabilité neutres (i.e. en l'absence de production d'énergie thermique), le problème ne dépendra que de \vec{U}_{oce} et \vec{U}_{atm} (alors que la température entre en jeu pour des conditions stables ou instables).
2. le flux à l'interface a uniquement une composante turbulente, alors que pour la température on devrait considérer en plus des composantes radiatives.

Dans la suite nous noterons h_{clo} la profondeur de la CLO et h_{cla} la hauteur de la CLA. Si on introduit la fonction $G_x(\sigma)$ définie par $G_x(\sigma) = \sigma(1 - \sigma)^2 H(1 - \sigma)$ (avec H la fonction

6.1 Formulation du problème

de Heaviside) les coefficients de viscosité (entre la surface et h_{bla} , respectivement h_{blo}) sont donnés par les relations

$$K_z^a(z) = \left[\frac{ku_{*,a}h_{cla}}{\phi_a(\zeta_a)} \right] G_a \left(\frac{z}{h_{cla}} \right) + \kappa_a \quad K_z^o(z) = \left[\frac{ku_{*,o}h_{clo}}{\phi_o(\zeta_o)} \right] G_o \left(\frac{z}{h_{clo}} \right) + \kappa_o \quad (6.2)$$

où $u_{*,a}$ et $u_{*,o}$ correspondent aux échelles de vitesse respectivement dans la CLA et la CLO et $\kappa_a, \kappa_o > 0$ à des diffusivités. On définit par ϕ_o et ϕ_a les fonctions empiriques dépendant des paramètres de stabilité ζ_o et ζ_a . Les fonctions G_x correspondent à des fonctions de forme du profil. Elles servent également à prolonger le profil de viscosité par une valeur constante positive en dehors de la couche limite : on aura donc bien $K_z^a > 0$ et $K_z^o > 0$ (ce qui assure que le problème est bien posé). Un profil typique de diffusion est représenté sur la figure 2.6.

Les valeurs de $h_{cla}(t)$ et $h_{clo}(t)$ varient en fonction de l'état turbulent de l'écoulement. Ces valeurs sont fortement influencées par le flux solaire et évoluent donc avec le cycle diurne. Si on choisit une valeur typique d'une fenêtre de temps comme étant de l'ordre de 6h, le cycle diurne sera résolu et on pourra faire l'hypothèse qu'à l'échelle d'une fenêtre de temps l'extension des couches limites est constante (i.e. $h_{cla}(t) = h_{cla}$ et $h_{clo}(t) = h_{clo}$). On considère une stabilité neutre (i.e. $\phi_a(\zeta_a) = \phi_o(\zeta_o) = 1$), (6.2) peut donc se reformuler plus simplement

$$K_z^a(z) = h_{cla}ku_{*,a}G_a \left(\frac{z}{h_{cla}} \right) + \kappa_a \quad K_z^o(z) = h_{clo}ku_{*,o}G_o \left(\frac{z}{h_{clo}} \right) + \kappa_o \quad (6.3)$$

On peut remarquer que seules les fonctions G_x dépendent de z .

Pour définir totalement le problème de couplage, il nous faut définir les conditions d'interface. Le flux turbulent de quantité de mouvement $\vec{\tau}$, d'après le §2.2, s'exprime en utilisant une formule *bulk*. La continuité de ce flux s'écrit :

$$\rho_{\text{atm}} K_z^a \frac{\partial \vec{U}_{\text{atm}}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \rho_{\text{oce}} K_z^o \frac{\partial \vec{U}_{\text{oce}}}{\partial z} \Big|_{\Gamma} = \vec{\tau} = C_D(\zeta_a) |\Delta U| \Delta U \quad (6.4)$$

avec $\Delta U = \vec{U}_{\text{atm}}(\varepsilon_a, t) - \vec{U}_{\text{oce}}(-\varepsilon_o, t)$. Au niveau des échelles turbulentes de vitesse, cette consistance est équivalente à $\rho_{\text{atm}} u_{*,a}^2 = \rho_{\text{oce}} u_{*,o}^2$. Cette dernière égalité montre que les profils verticaux de viscosité dans l'océan et dans l'atmosphère dépendent du flux de surface par l'intermédiaire des termes $u_{*,a}$ et $u_{*,o}$. En pratique, la détermination des profils de diffusion s'effectue en deux étapes : le flux de surface (donné ici par une formule *bulk*) permet de diagnostiquer la valeur de $u_{*,a}$ (resp. $u_{*,o}$) qui permet le calcul du profil vertical $K_z^a(z)$ (resp.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

$K_z^o(z)$). Par ailleurs, nous faisons l'hypothèse d'une stabilité neutre. Dans (6.4) nous aurons donc $C_D(\zeta_a) = C_{DN}$, avec C_{DN} supposé constant dans (6.4).

Sous les hypothèses d'une stabilité neutre et de couches limites de taille constante, l'algorithme de Schwarz incluant les paramétrisations physiques s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{U}_{\text{atm}}^k}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z^a(z)^k \frac{\partial \vec{U}_{\text{atm}}^k}{\partial z} \right) = f \quad z \in \Omega_{\text{atm}} \quad t \in [0, T] \\ \vec{U}_{\text{atm}}(z, 0) = \vec{V}_0(z) \quad z \in \Omega_{\text{atm}} \\ \rho_{\text{atm}} \left(K_z^a \frac{\partial \vec{U}_{\text{atm}}}{\partial z} \right)^k (0, t) = \vec{\tau} = C_{DN} |\vec{U}_{\text{atm}}^k(\varepsilon_a, t) - \vec{U}_{\text{oce}}^{k-1}(-\varepsilon_o, t)| (\vec{U}_{\text{atm}}^k(\varepsilon_a, t) - \vec{U}_{\text{oce}}^{k-1}(-\varepsilon_o, t)) \\ (u_{*,a}^k)^2 = \frac{|\vec{\tau}|}{\rho_{\text{atm}}} \\ K_z^a(z)^k = h_{cla} k u_{*,a}^k G_a(z/h_{cla}) + \kappa_a \quad z \in \Omega_{\text{atm}} \end{array} \right. \quad (6.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{U}_{\text{oce}}^k}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z^o(z)^k \frac{\partial \vec{U}_{\text{oce}}^k}{\partial z} \right) = f \quad z \in \Omega_{\text{oce}} \quad t \in [0, T] \\ \vec{U}_{\text{oce}}(z, 0) = \vec{V}_0(z) \quad z \in \Omega_{\text{oce}} \\ \rho_{\text{oce}} \left(K_z^o \frac{\partial \vec{U}_{\text{oce}}}{\partial z} \right)^k (0, t) = \vec{\tau} = C_{DN} |\vec{U}_{\text{atm}}^k(\varepsilon_a, t) - \vec{U}_{\text{oce}}^{k-1}(-\varepsilon_o, t)| (\vec{U}_{\text{atm}}^k(\varepsilon_a, t) - \vec{U}_{\text{oce}}^{k-1}(-\varepsilon_o, t)) \\ (u_{*,o}^k)^2 = \frac{|\vec{\tau}|}{\rho_{\text{oce}}} \\ K_z^o(z)^k = h_{clo} k u_{*,o}^k G_o(z/h_{clo}) + \kappa_o \quad z \in \Omega_{\text{oce}} \end{array} \right. \quad (6.6)$$

Cet algorithme converge vers la solution du modèle couplé satisfaisant les paramétrisations physiques de couches limites et les paramétrisations usuelles des flux air-mer. Pour procéder à l'étude de convergence de cet algorithme, les difficultés sont nombreuses. Tout d'abord nous voyons que les profils verticaux de viscosités dépendent des itérations. Cette complexité n'avait pas été traitée dans la partie 2 de ce manuscrit, car nous avons fait l'hypothèse que ces profils variaient uniquement en fonction de l'éloignement à l'interface. Ceci signifie

également qu'en toute rigueur K_z^a et K_z^o varient avec le temps. Une difficulté supplémentaire vient de la non-linéarité de la condition de transmission.

Nous proposons dans la section suivante d'effectuer l'étude de convergence de l'algorithme composé des systèmes (6.5) et (6.6) en faisant un certain nombre d'hypothèses rendant l'étude possible analytiquement.

6.2 Etude de convergence

L'étude de convergence de l'algorithme (6.5-6.6) sans hypothèses supplémentaires est très complexe à traiter. Cependant son étude complète fournirait des informations très intéressantes, en permettant notamment d'identifier les situations physiques les plus "dangereuses" pour la convergence de l'algorithme. Pour cette raison, nous pouvons d'ores et déjà placer cela parmi les perspectives de nos travaux. Nous allons ici grandement simplifier le problème afin d'obtenir rapidement une première estimation de l'ordre de grandeur du facteur de convergence. Nous faisons les simplifications suivantes :

1. Les échelles de vitesse $u_{*,o}$ et $u_{*,a}$ ne dépendent pas des itérations et sont fixes dans le temps. Cette hypothèse rend également $K_z^a(z)$ et $K_z^o(z)$ indépendants de l'itération de Schwarz k .
2. La condition limite à l'interface air-mer peut s'écrire sous la forme

$$\begin{cases} \left(K_z^o \frac{\partial \vec{U}_{\text{atm}}}{\partial z} \right) (0, t) = \frac{C_{DN} |\Delta \vec{U}|}{\rho_{\text{atm}}} (\vec{U}_{\text{atm}}(0^+, t) - \vec{U}_{\text{oce}}(0^-, t)) \\ \left(K_z^a \frac{\partial \vec{U}_{\text{oce}}}{\partial z} \right) (0, t) = \frac{C_{DN} |\Delta \vec{U}|}{\rho_{\text{oce}}} (\vec{U}_{\text{atm}}(0^+, t) - \vec{U}_{\text{oce}}(0^-, t)) \end{cases} \quad (6.7)$$

en considérant $\Delta \vec{U}$ et C_{DN} constants et $\varepsilon_a \rightarrow 0^+$ (resp. $-\varepsilon_o \rightarrow 0^-$). L'intérêt de cette hypothèse est de rendre linéaire la condition de transmission à l'interface.

3. On considère les profils verticaux de viscosité constants et égaux à leur valeur à l'interface.

A partir de ces hypothèses l'étude de convergence s'effectue très simplement en écrivant les erreurs dans l'espace de Fourier

$$\hat{e}_{\text{atm}}(z, \omega) = \alpha(\omega) \exp\left(-\sqrt{\frac{i\omega}{K_z^a(0)}} z\right) \quad \hat{e}_{\text{oce}}(z, \omega) = \beta(\omega) \exp\left(\sqrt{\frac{i\omega}{K_z^o(0)}} z\right) \quad (6.8)$$

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

Les conditions limites à l'interface air-mer à une itération de Schwarz k s'écrivent

$$\begin{cases} -\sqrt{i\omega K_z^a(0)}\alpha^k(\omega) &= \frac{C_{DN}|\Delta\vec{U}|}{\rho_{\text{atm}}} (\alpha^k(\omega) - \beta^{k-1}(\omega)) \\ \sqrt{i\omega K_z^o(0)}\beta^k(\omega) &= \frac{C_{DN}|\Delta\vec{U}|}{\rho_{\text{oce}}} (\alpha^k(\omega) - \beta^{k-1}(\omega)) \end{cases} \quad (6.9)$$

et finalement nous pouvons exprimer le facteur de convergence :

$$\rho_{\text{bulk}} = \left| \frac{\beta^k}{\beta^{k-1}} \right| = \left(\frac{\rho_{\text{atm}}}{\rho_{\text{oce}}} \right) \left| \frac{C_{DN}|\Delta\vec{U}|}{\rho_{\text{atm}}\sqrt{i\omega K_z^o(0)} + \sqrt{\frac{K_z^o(0)}{K_z^a(0)}}C_{DN}|\Delta\vec{U}|} \right| \quad (6.10)$$

Pour avoir une idée de l'ordre de grandeur de ρ_{bulk} et notamment du terme $C_{DN}|\Delta\vec{U}|$, nous pouvons nous référer à l'étude menée par Large & Pond (1981), dans laquelle des valeurs empiriques du coefficient d'échange sont fournies en fonction de la vitesse U_{10} du vent à 10 mètres :

$$10^3 C_{DN} = \begin{cases} 1.2 & 4 \leq U_{10} < 11 m.s^{-1} \\ 0.49 + 0.065 U_{10} & 11 \leq U_{10} \leq 25 m.s^{-1} \end{cases} \quad (6.11)$$

De plus, afin d'évaluer l'ordre de grandeur du terme $\frac{K_z^o}{K_z^a}$ à l'interface air-mer, on peut remarquer que $\frac{K_z^o}{K_z^a} = \frac{h_{clo} u_{*,o}}{h_{cla} u_{*,a}}$ en supposant que pour z petit $G_o(z/h_{clo}) \approx G_a(z/h_{cla})$. Typiquement la hauteur de la CLA est de l'ordre de 1000m et la profondeur de la CLO de l'ordre de 100m. De plus, comme nous l'avons dit précédemment, les échelles de vitesse vérifient $\rho_{\text{atm}} u_{*,a}^2 = \rho_{\text{oce}} u_{*,o}^2$. Ces deux remarques nous permettent de trouver que $\frac{K_z^o(0)}{K_z^a(0)} \approx 10^{-1} \sqrt{\frac{\rho_{\text{atm}}}{\rho_{\text{oce}}}} \approx 0.032$. Enfin on choisira $K_z^o = 1.2 \times 10^{-4} m^2.s^{-1}$, cette valeur étant représentative de l'ordre de grandeur de ce terme. A partir de tous ces éléments et en choisissant $|\Delta\vec{U}| = 6 m.s^{-1}$, on obtient

$$\rho_{\text{bulk}}(\omega) \approx \left(\frac{\rho_{\text{atm}}}{\rho_{\text{oce}}} \right) \left| \frac{1.2 \times 10^{-3} \times 6}{\sqrt{i\omega}\sqrt{1.2 \times 10^{-4}} + \sqrt{0.032} \times 1.2 \times 10^{-3} \times 6} \right| \approx 10^{-3} \left| \frac{0.072}{0.011\sqrt{i\omega} + 0.0013} \right| \quad (6.12)$$

Ce facteur de convergence est clairement décroissant lorsque ω augmente. Le cas le plus défavorable est donc pour $\omega \rightarrow 0$. On a alors $\rho_{\text{bulk}}(\omega = 0) \approx \frac{10^{-3}}{\sqrt{0.032}} \approx 5.6 \times 10^{-3}$. Si on fait varier les différents paramètres cet ordre de grandeur reste approximativement le même car le facteur de convergence est dominé par le terme $\rho_{\text{atm}}/\rho_{\text{oce}} \approx 10^{-3}$. Notre étude théorique avec des conditions de transmission proches de celles données par les paramétrisations usuelles,

prévoit une convergence très rapide de la méthode. Cependant cela dépend de la validité des simplifications effectuées. Pour vérifier cela en pratique, on va procéder à la mise en oeuvre de la méthode avec des modèles réalistes.

6.3 Une application avec des modèles réalistes

Dans la première partie de ce chapitre nous avons formulé le problème de couplage et nous avons montré, dans la limite de certaines simplifications, la convergence de l'algorithme que l'on envisage d'utiliser pour sa résolution. Nous proposons maintenant de procéder à une validation numérique dont l'objectif est de montrer la viabilité de l'algorithme de Schwarz dans le cadre d'une application concrète. Nous avons pris l'option de directement passer de notre étude théorique 1D à une application réaliste 3D pour plusieurs raisons. Tout d'abord la mise en place d'un cas-test idéalisé simplifié ayant un sens au niveau physique n'est pas aisée car cela nécessite de bonnes connaissances physiques au niveau de l'océan et de l'atmosphère. Nous avons de plus jugé intéressant de vérifier la convergence de l'algorithme avec des modèles *meso-échelle* très couramment utilisés afin de pouvoir plus facilement montrer l'intérêt de la méthode aux modélisateurs. De notre point de vue, l'étape suivante, que nous mentionnerons dans les perspectives de cette thèse, sera donc de revenir un cran en arrière pour faire une validation rigoureuse d'un point de vue physique de la méthode dans des cas simplifiés (en sachant au préalable que celle-ci semble d'hors et déjà viable sur des cas plus complexes).

Nous avons choisi comme cadre applicatif l'étude de la formation et de la propagation d'un cyclone tropical. Nous précisons que l'objectif n'est pas de faire l'étude physique détaillée des résultats, mais plutôt de s'intéresser au comportement de différentes méthodes de couplage.

6.3.1 Contexte

Cette application réaliste au cyclone Erica a été effectuée dans le cadre du projet ANR "Cyclones et Climats" piloté par Christophe Menkes (IRD Nouméa). L'objet de ce projet ANR est la compréhension des liens entre l'activité cyclonique régionale dans la région du Pacifique Sud-Ouest et les phénomènes grande échelle *El-Nino/La-Nina*. Cette région comprend un grand nombre de petites îles à forte densité de population et est ainsi très vulnérable aux événements climatiques extrêmes. Plus généralement, ce projet s'inscrit dans une démarche qui consiste à évaluer l'impact des phénomènes régionaux à petite échelle sur

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

l'évolution du climat grande échelle, comme cela est également entrepris notamment par Large & Danabasoglu (2006).

6.3.2 Modèles numériques

Dans le cadre de cette étude nous avons utilisé le modèle atmosphérique WRF et le modèle d'océan ROMS-AGRIF, que nous avons succinctement introduits dans le chapitre 1.

Le modèle ROMS (Shchepetkin & McWilliams, 2005) est un modèle régional à surface libre explicite, conçu sous les hypothèses hydrostatique et de Boussinesq. Les équations sont formulées en utilisant une coordonnée verticale σ dite de suivi de terrain. La grille sur la verticale est non-uniforme afin de pouvoir augmenter la résolution près de l'interface air-mer. Notre expérience est mise en place sur une configuration avec quatre frontières ouvertes, 32 niveaux verticaux et une grille horizontale de 146×102 points avec $\Delta x = 20\text{km}$ et $\Delta t = 1800\text{s}$. Les forçages aux bords sont construits à partir des réanalyses ECCO grâce à des outils génériques existants (Penven *et al.*, 2008).

Le modèle atmosphérique WRF-ARW (Skamarock *et al.*, 2005, 2008) intègre les équations d'Euler compressibles, non-hydrostatiques formulées en utilisant une coordonnée verticale η de suivi de terrain, basée sur la masse. La grille du modèle a une résolution horizontale de 35km avec 31 niveaux verticaux. Les données aux bords sont fournies par les réanalyses NCEP2 via l'outil de *preprocessing* WRFSL. Le calcul des flux air-mer est directement effectué par le schéma de couche limite de surface du modèle WRF, basé sur la théorie de Monin-Obukhov.

Deux aspects importants lors du développement d'un modèle couplé sont la phase d'initialisation et la manière dont les informations sont échangées entre les grilles de calcul des deux modèles considérés.

6.3.3 Initialisation des modèles couplés

Comme nous l'avons mentionné dans le §1.1.5, la détermination de la condition initiale revêt une importance toute particulière lorsque l'on considère un système de prévision. Dans l'optique de l'élaboration d'un modèle couplé, pour des fins opérationnelles par exemple, ce problème devient d'ailleurs crucial. De nombreuses méthodologies ont été élaborées pour initialiser les modèles d'océan et d'atmosphère (pris séparément); citons par exemple les

6.3 Une application avec des modèles réalistes

méthodes d'interpolation optimale, de *nudging*, de filtrage etc. Toutefois dès que l'on considère un modèle couplé, la littérature devient beaucoup plus rare, et il s'agit là vraisemblablement d'un manque à combler. Il faut noter que les modèles couplés utilisés pour effectuer des prévisions saisonnières dans les centres opérationnels sont généralement initialisés en traitant séparément le modèle d'océan et celui d'atmosphère. Il n'est a priori pas suffisant d'initialiser le couplage de cette façon, sans prendre en compte les interactions air-mer, il faut considérer le modèle couplé dans son ensemble. En effet, même si les deux composantes sont initialisées de manière "optimale", cela ne permet pas d'éviter les chocs initiaux et les bruits car les deux modèles ne seront pas en équilibre à l'instant initial de la prévision. Les diverses procédures d'initialisation se basent généralement sur des observations de température ou de vent (entre autres). Les diverses méthodes ont pour objectif de faire une utilisation optimale du couple modèle numérique-observations. Pendant que les équations du modèle assurent la consistance dynamique, les observations fournissent des informations sur les conditions physiques réelles.

Quelques études ont été menées afin d'initialiser les modèles de manière couplée, à partir d'observations. Citons par exemple Chen *et al.* (1997) qui propose une méthodologie relativement simple basée sur une méthode de *nudging* (ou *relaxation newtonienne*). Cela consiste à débiter la simulation à un instant t_n précédant l'instant initial t_i souhaité. La simulation commence alors à $t = t_n$ et entre t_n et t_i la tension de vent τ_m modélisée est relaxée vers des observations τ_o . En pratique, la tension de vent τ_m est modifiée en $\alpha\tau_o + (1 - \alpha)\tau_m$ avec α un coefficient de rappel constant ou proportionnel à l'écart entre τ_m et τ_o . Cette méthode permet donc de relaxer les deux modèles vers un flux de quantité de mouvement réaliste à leur interface et ainsi à l'instant t_i on peut supposer que les modèles sont équilibrés. Cependant la détermination de l'instant t_n adéquat et de α n'est pas triviale.

Dans un modèle couplé simplifié, Lee *et al.* (2000) proposent d'assimiler des données de température de l'eau T , de hauteur de surface libre h et de tension de vent τ . La méthodologie est basée sur les méthodes de contrôle optimal, où l'on cherche à minimiser l'écart entre la solution des modèles X_m et les observations X_o représenté par la fonction coût J suivante

$$\begin{aligned}
 J = & (h_m - h_o)^T W_h (h_m - h_o) + (T_m - T_o)^T W_T (T_m - T_o) \\
 & + (\tau_m^x - \tau_o^x)^T W_\tau (\tau_m^x - \tau_o^x) + (\tau_m^y - \tau_o^y)^T W_\tau (\tau_m^y - \tau_o^y)
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

où les matrices W (considérées diagonales ici) contiennent les informations statistiques sur les erreurs de mesure. L'objectif est alors de rechercher la solution du modèle couplé qui minimise J en ajustant des variables de contrôle (typiquement la condition initiale et les paramètres du modèle). L'étude est réalisée dans un cadre plus général dont l'objectif n'est pas uniquement la détermination optimale de la condition initiale. Ils proposent également de contrôler, entre autres, le coefficient de friction C_D (voir §2.2.5). Compte tenu des diverses remarques que nous avons émises dans le chapitre 2, il semble tout à fait pertinent de chercher à contrôler les coefficients d'échange C_D , C_H et C_E car ceux-ci contiennent une grande partie de l'erreur associée aux flux air-mer.

Enfin, dans Ballabrera-Poy *et al.* (2001) l'utilisation d'un filtre de Kalman de rang réduit (filtre *SEEK*) est suggérée. Dans cette étude les données assimilées par le modèle couplé sont la profondeur de la thermocline, la température de surface et la tension de vent. L'utilisation d'un filtre de rang réduit rend cette méthode attractive en terme de coût de calcul par rapport à celles présentées précédemment.

Les méthodologies que nous avons introduites ici ont été appliquées dans des cas relativement idéalisés et ont rarement été étendues aux modèles aux équations primitives. L'initialisation par l'intermédiaire d'une stratégie de nudging est simple à mettre en oeuvre et peut être étendue afin de prendre en compte la température de surface de l'océan et l'altimétrie. Cependant la détermination des coefficients de rappel reste problématique. L'approche qui consiste à minimiser l'écart entre l'état du modèle et les observations en contrôlant des paramètres, dont l'incertitude est parfois importante, paraît théoriquement très attractive. Cependant la mise en pratique de cette méthode n'est pas triviale et nécessite la dérivation d'un code adjoint pour le calcul du gradient de la fonction coût J . En ce qui concerne l'utilisation du filtre *SEEK*, ceci peut être approprié à la vue des études précédemment menées avec ce genre de méthodologie dans le cadre des modèles d'océan (non couplés) (Brasseur *et al.*, 1999).

Pour notre application nous avons choisi une méthodologie très simple d'initialisation. Le modèle d'atmosphère est intégré pendant la semaine précédent le début de la simulation couplée, en étant forcé au dessus de l'océan par une température de surface grande échelle (issue des réanalyses NCEP2). Le modèle d'océan a été intégré pendant les 6 mois précédent

6.3 Une application avec des modèles réalistes

l'instant initial afin d'équilibrer la dynamique meso-échelle. En surface le modèle est rappelé vers le même champ de température de surface que celui utilisé pour forcer le modèle d'atmosphère.

6.3.4 Traitement des non-conformités en espace

Jusqu'à maintenant nous avons traité le problème de couplage sous la forme simplifiée d'une équation 1D sur la verticale. Cependant, dès que l'on considère des configurations réalistes à 2 ou 3 dimensions, un problème supplémentaire se pose : la non-conformité en espace des grilles de calcul des deux modèles numériques à coupler. Dans le contexte de l'algorithme de Schwarz, des méthodes pour gérer ces conformités ont été proposées (Gander *et al.*, 2003) sur des maillages structurés ou non-structurés. Nous considérons ici le problème uniquement dans le cadre de maillages structurés, c'est à dire des maillages qui par transformation géométrique peuvent se ramener à une grille rectangulaire. La solution la plus simple pour remédier à ce problème est évidemment de choisir des grilles identiques dans les deux modèles. Cependant, pour de nombreuses raisons, on souhaitera pouvoir choisir les grilles des modèles indépendamment les unes des autres. En effet il est souvent préférable d'adapter la résolution des grilles en fonction des phénomènes physiques que l'on souhaite représenter dans chaque milieu. De plus, pour des raisons pratiques, on peut être amené à choisir une résolution plus grossière pour le modèle engendrant le coût de calcul le plus important. Enfin, aussi bien dans l'océan que dans l'atmosphère, les problèmes sont traités sur des géométries sphériques, ce qui requiert l'utilisation de méthodes de projection qui sont parfois différentes suivant les modèles.

De manière générale, dans un modèle couplé *two-way*, les variables d'état ainsi que les flux de chaleur et d'eau douce doivent être interpolés (fréquemment) de la grille d'un modèle à celle du modèle voisin. De plus les flux requièrent une attention toute particulière car ils doivent être interpolés de manière conservative.

Outil usuel d'interpolation : la librairie SCRIP

La très grande majorité des modèles couplés utilisent la librairie SCRIP¹ qui est notamment intégrée au coupleur OASIS et qui possède une procédure adaptée pour le traitement

¹Spherical Coordinate Remapping and Interpolation Package

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

des pôles (intéressant dans le cadre de modèles globaux). La base technique de cette librairie est décrite dans Jones (1999) et correspond à un ensemble de méthodes d'interpolation "classiques" de type bilinéaire ou bicubique ainsi que des méthodes conservatives. La reconstruction du champ d'une grille source sur une grille destination se ramène à un produit matrice-vecteur où la matrice contient les poids affectés à chaque point de la grille source. On parle de méthode de *remapping*. Cette méthode d'interpolation est performante car la matrice est calculée une fois pour toutes (pourvu que les grilles de calcul ne soient pas évolutives) en début de simulation et est aisément parallélisable. Cette méthode est de plus populaire car la conservation locale des quantités peut être approchée. En reprenant les notations de Jones (1999), sur une cellule k d'aire A_k sur la grille destination, le flux moyen \bar{F}_k doit localement satisfaire

$$\bar{F}_k = \frac{1}{A_k} \int_{A_k} f dA \quad (6.14)$$

avec f le flux correspondant sur la grille source. Il est trivial de voir que si pour toutes les mailles k la conservation locale (6.14) est vérifiée, alors la conservation globale du flux est également satisfaite. En pratique le flux \bar{F}_k est défini simplement comme une somme pondérée par la taille de la zone de recouvrement A_{nk} entre la maille k sur la grille destination et la maille n de flux local f_n sur la grille source. On a donc

$$\bar{F}_k = \frac{1}{A_k} \sum_{n=1}^N \int_{A_{nk}} f_n dA \quad (6.15)$$

Une première stratégie consiste à considérer que f_n est constant sur la maille n . Il est aussi proposé de procéder à un développement de Taylor de f autour de r_n (le centroïde de la cellule i.e. le centre quand on considère des rectangles)

$$f_n = \bar{f}_n + \nabla f \cdot (r - r_n) \quad (6.16)$$

En considérant la valeur de f_n constante sur la maille n , on obtient un schéma conservatif de reconstruction d'ordre 1, et en procédant au développement de Taylor (6.16) le schéma devient d'ordre 2 (pourvu que ∇f soit une approximation d'ordre au moins 1 du gradient). On omet ici de décrire les détails de la phase de *preprocessing* qui correspond à la détermination des aires des régions de recouvrement A_{nk} . Les détails peuvent être trouvés dans la documentation technique de la librairie. Le point faible de SCRIP est de ne pas proposer de méthode d'extrapolation, qui est pourtant indispensable dès que l'on traite des champs avec des valeurs non définies en certains points (les points en terre pour l'océan).

6.3 Une application avec des modèles réalistes

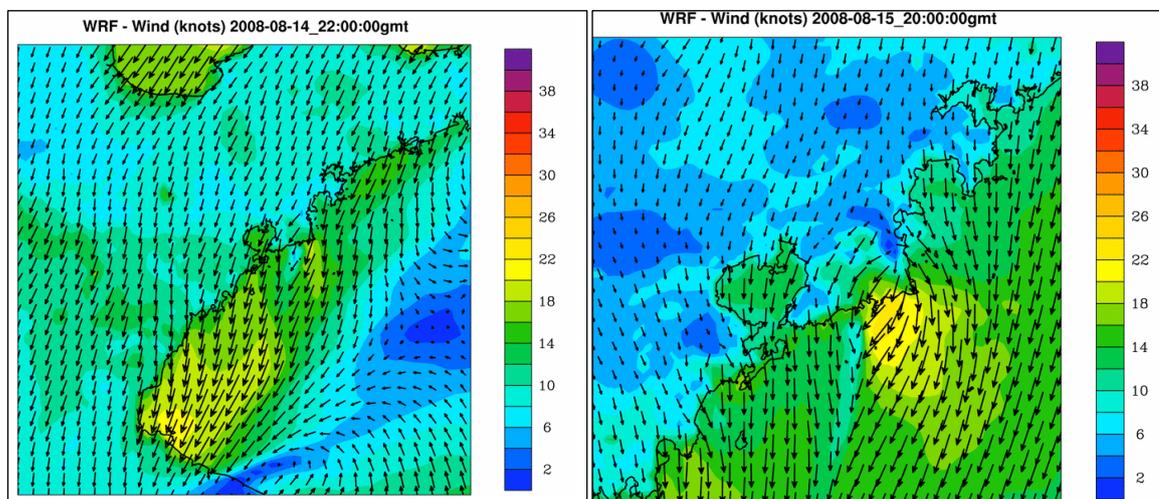


Fig. 6.1: Exemples de champs de vents à 10 mètres (obtenus avec le modèle WRF) dans l'atmosphère typique des zones côtières, ici dans la baie de Qingdao en Chine (lieu des épreuves de voile des Jeux Olympiques 2008). La résolution horizontale est de 6 km pour l'image de gauche et de 2 km pour l'image de droite.

Masquage des champs et extrapolations

Les modèles couplés régionaux sont principalement utilisés pour étudier les zones côtières. Une partie des points du modèle d'océan sont donc en terre, il faut alors les masquer car ils ne participent pas au calcul. La difficulté va être d'interpoler les valeurs près des côtes (souvent irrégulières). On doit dans tous les cas bannir l'utilisation de valeurs en terre (du modèle d'atmosphère) pour affecter des valeurs aux points en mer. En effet, comme l'illustre la figure 6.1, près des côtes l'intensité et la direction du vent peut varier de façon significative entre un point en terre et un point en mer. Une attention toute particulière doit donc être apportée notamment au niveau de l'interpolation des vents *nearshore*. Plus généralement, chaque modèle possède sa propre résolution et donc son propre trait de côte, ce qui rend parfois nécessaire le recours à des extrapolations. Ce problème implique aussi que l'aire de la partie en mer vue par les deux modèles est différente, ce qui ne permet pas d'assurer des propriétés de conservation strictes des flux. Pour remédier à ce problème, il est possible d'utiliser des masques fractionnaires mais cette pratique n'est pas très répandue dans les modèles actuels.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

Si l'on se réfère notamment aux travaux de Chelton *et al.* (2001), le schéma d'interpolation doit permettre une bonne reconstruction du rotationnel du vent et des gradients de température de surface de l'océan. Une interpolation bicubique paraît alors bien appropriée malgré le fait qu'elle ne soit pas monotone. Une alternative pourrait être l'utilisation de méthodes locales de reconstruction conservatives comme PPM¹ avec des limiteurs de pente afin d'assurer la monotonie. Cependant ce genre de méthode s'avérerait très coûteuse et serait nécessairement sous-optimale en terme de coût de calcul par rapport aux méthodes de remapping. L'utilisation que nous avons faite dans le cadre de travaux antérieurs² de la librairie SCRIP, pour le développement d'outils d'interpolations (pour le preprocessing de modèles emboîtés pour les modèles d'océan (Jouanno *et al.*, 2008)), a montré que cet outil était tout à fait approprié en terme de compromis entre la qualité du champ interpolé et la vitesse d'exécution. Pour la présente étude nous avons donc choisi cette librairie, à laquelle un schéma d'extrapolation a été ajouté et quelques optimisations ont également été apportées. Le schéma d'extrapolation est relativement simple, il consiste en une somme pondérée des valeurs voisines non masquées. Cette pondération est effectuée par l'intermédiaire d'un développement de Taylor donnant l'erreur que l'on commet si l'on remplace la valeur du point en (x, y) où l'extrapolation est nécessaire par la valeur de son voisin en $(x + h_x, y + h_y)$

$$|f(x + h_x, y + h_y) - f(x, y)| \approx \left| h_x \frac{\partial f}{\partial x} + h_y \frac{\partial f}{\partial y} \right| \quad (6.17)$$

Cette formule permet de déterminer les poids affectés à chaque point voisin. Etant donné que l'aire de la région en mer est différente dans les deux modèles, il ne nous est pas apparu indispensable de chercher à imposer la stricte conservation des flux. Ceci n'est a priori pas problématique lorsque l'on s'intéresse à des simulations régionales sur des échelles de temps très courtes. Cependant, pour des expériences climatiques à long terme, cela devient indispensable pour minimiser la dérive des modèles.

6.3.5 Résultats physiques

Nous avons introduit jusqu'à maintenant les détails algorithmiques et les modèles utilisés pour le couplage que l'on souhaite réaliser. La mise en oeuvre au niveau informatique a

¹Piecewise Parabolic Method

²http://www-ljk.imag.fr/membres/Florian.Lemarie/NEMO_AGRIF/index.html

6.3 Une application avec des modèles réalistes

ensuite été réalisée pour une simulation couplée de 16 jours entre le 1er et le 16 Mars 2003. Avant de présenter les résultats physiques nous souhaitons préciser certains aspects attachés à l'étude d'un phénomène cyclonique.

Limitations

Tout d'abord il faut être conscient du fait que les formules *bulk* ne sont pas calibrées pour être précises lors d'événements extrêmes, il peut donc en résulter des erreurs significatives lors du calcul des flux. De plus, un point concomitant qui joue sur la qualité des flux calculés est le fait de négliger l'effet des vagues. Les interactions vagues-courant sont très marquées dès que l'on s'intéresse à des phénomènes cycloniques, ce qui signifie que les courants calculés par le modèle d'océan peuvent être entachés d'erreurs. Pour cette raison, nous avons donc exclu la prise en compte des courants océaniques dans le calcul du flux de quantité de mouvement, ceux-ci sont considérés comme nuls. Un autre élément important à noter est que, pour être en mesure de confronter nos résultats à des observations, il faudrait procéder à une validation systématique des forçages aux bords et de la topographie (respectivement de la bathymétrie), ce que nous n'avons pas effectué ici. Enfin il faut ajouter que contrairement à l'atmosphère où l'état initial est proche de celui réellement observé le 1er Mars 2003, l'état de l'océan au début de la simulation couplée est seulement représentatif de l'activité *meso-échelle* de la région mais n'est pas rigoureusement proche de l'état réel observé à cette date. Pour ce faire il aurait fallu adopter une technique d'assimilation de données ; or, nous avons uniquement ajouté un rappel en surface vers une SST de résolution très grossière (250km).

Pour ces différentes raisons, il est plus approprié de considérer notre étude sous la forme d'expériences jumelles, sans chercher une comparaison directe avec les observations, notre objectif principal étant d'évaluer le comportement de l'algorithme de Schwarz dans un cadre réaliste.

Description des expériences réalisées

Nous avons réalisé quatre simulations avec des techniques de couplage différentes. Une première simulation consiste en un mode "forcé" (ou couplage *1-way*) où le modèle d'atmosphère est forcé en surface par une SST grande échelle (issue de la réanalyse NCEP2). Les trois autres stratégies sont en mode couplé *2-way* avec un découpage de la durée totale de simulation en fenêtres temporelles de 6h. Une première méthode consiste à réaliser une

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

unique itération de Schwarz sur chaque fenêtre (cf algorithme (5.11)), une seconde méthode revient à effectuer deux itérations et enfin une troisième méthode correspond à l'obtention d'un état convergé sur chaque fenêtre de temps. Compte tenu de la complexité physique du problème, le critère permettant d'affirmer qu'un état convergé est atteint n'est pas clairement définissable. Pour cette raison nous avons choisi de systématiquement procéder à 9 itérations de Schwarz sur chaque fenêtre temporelles en faisant l'hypothèse que cela est suffisant pour mener l'algorithme à convergence (en nous basant sur l'étude du §6.2). Il sera de plus intéressant de constater dans le cas où la convergence est obtenue en moins de 9 itérations si des phénomènes oscillatoires apparaissent ou non du fait des itérations sur-numéraires. Nous ne proposons pas de stratégie de couplage au niveau du pas de temps des modèles car cela nécessiterait une quantité de travail non négligeable sur le plan informatique. Toutes les simulations sont effectuées à partir des mêmes conditions initiales et conditions aux bords dans l'océan et dans l'atmosphère. Notons qu'il n'a pas été nécessaire de recourir à une "stimulation" artificielle afin de générer le cyclone tropical (*bogus injection*) comme cela est souvent fait. Ceci s'explique par le fait que la perturbation initiale à l'origine du cyclone était présente dans les forçages utilisés.

Détails techniques

Au niveau des champs échangés entre les modèles, le modèle d'océan envoie sa température de surface moyennée sur la fenêtre de temps (de 6h ici) et reçoit des flux de chaleur et d'eau douce moyens sur 6h ainsi que des flux horaires de quantité de mouvement. Comme nous l'avons précisé auparavant les différentes composantes de ces flux sont calculées dans le schéma de couche de surface du modèle WRF. Au niveau du modèle d'océan les flux moyens ne sont pas conservés constants sur toute une fenêtre de temps car cela pourrait causer des chocs assez importants lorsque l'on passe d'une fenêtre à l'autre. Sur chaque fenêtre on reconstruit linéairement (en prenant en compte les pas de temps de chaque modèle au niveau discret) l'évolution du flux à partir de l'information disponible au début de la fenêtre (provenant de la fenêtre de temps précédente) et du flux moyen fourni par le modèle d'atmosphère. Cette stratégie, schématiquement représentée par la figure 6.2, permet une transition lisse entre les flux sur différentes fenêtres de temps.

Nous avons vu précédemment qu'il est relativement compliqué de s'assurer que les bords des domaines de calcul de chaque modèle coïncident parfaitement. Pour notre étude, le

6.3 Une application avec des modèles réalistes

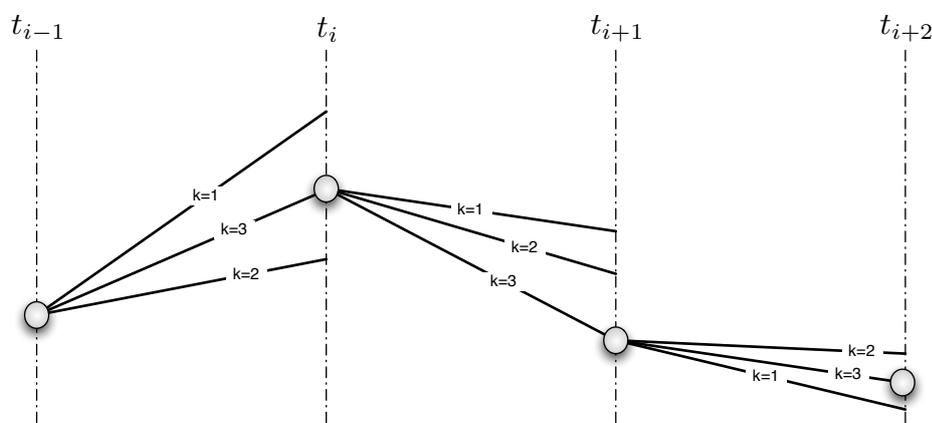


Fig. 6.2: Technique de reconstruction des flux linéairement par morceaux. L'indice k correspond à l'indice de l'itération sur une fenêtre de temps $[t_i, t_{i+1}]$ (on suppose ici un algorithme qui converge en 3 itérations). A partir de la valeur en t_i obtenue sur la fenêtre $[t_{i-1}, t_i]$ et de la valeur du flux moyen sur $[t_i, t_{i+1}]$ on reconstruit linéairement le flux pour affecter une valeur en t_{i+1} .

domaine de calcul du modèle d'atmosphère est volontairement choisi de plus grande emprise que celui d'océan. Nous avons fait ce choix en raison notamment de la spécification des frontières ouvertes dans le modèle WRF, décrite par la figure 6.3. En effet, dans la zone spécifiée correspondant à une maille sur le bord extérieur du domaine la SST n'intervient pas. Il n'y a donc a priori pas nécessité de fournir une valeur de température de surface de l'océan en ce point.

Pour la mise en oeuvre informatique du couplage, nous avons développé un programme Fortran permettant de gérer les échanges (qui sont réalisés par fichiers) entre les deux modèles. Chaque modèle à la fin d'une fenêtre de temps génère des fichiers de redémarrage permettant ensuite de repartir du même état sur la fenêtre de temps suivante. Nous n'avons pas spécifiquement envisagé la conception d'un outil informatique de couplage propre facilitant la mise en oeuvre de la méthode. Les modèles adoptent aujourd'hui une normalisation des formats notamment pour faciliter l'utilisation d'outils génériques de couplage comme MCT et OASIS. Le plus approprié et le plus immédiat serait probablement de passer par ces outils pour mettre en oeuvre l'algorithme de couplage.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

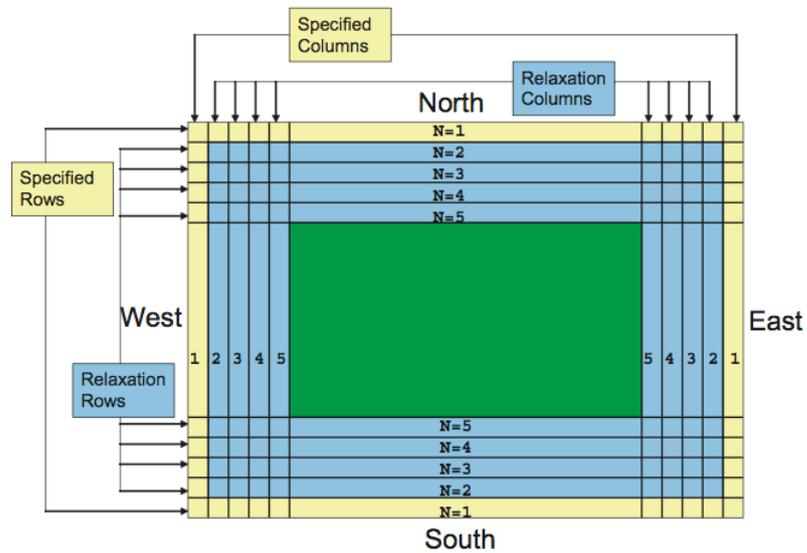


Fig. 6.3: Gestion des frontières ouvertes dans le modèle d'atmosphère WRF. Sur la maille extérieure on spécifie directement la valeur de la donnée grande échelle. Cette zone "spécifiée" est complétée par une zone de relaxation pour assurer une bonne transition avec les données à l'intérieur du domaine (Source : Skamarock *et al.*, 2005).

6.3 Une application avec des modèles réalistes

Etude des résultats

Les figures 6.4, 6.5 et 6.6 présentent l'évolution du vent à 10 mètres, de la température de surface de l'océan, de la pression au niveau de la mer et de précipitations pour la simulation couplée de référence obtenue à convergence de l'algorithme de Schwarz. On remarque notamment la signature du passage du cyclone sur la température de surface de l'océan où le mélange induit par les vents violents donne des températures de surface plus froides. Ceci est également clairement visible sur les observations satellites présentées sur la figure 6.7.

Les figures 6.9 et 6.10 montrent l'évolution de la température de surface de l'océan et de la vitesse du vent le long de la trajectoire du cyclone. La trajectoire du cyclone est elle-même déterminée en fonction du minimum de pression au niveau de la mer. Pour la simulation non couplée nous remarquons que l'intensité du cyclone est beaucoup plus forte qu'en mode couplé, avec des différences pouvant atteindre 20 noeuds ($\approx 37\text{km/h}$). En effet, en mode forcé l'océan représente une source d'énergie de capacité infinie pour l'atmosphère. Pour cette raison l'intensité du cyclone sera plus forte dans ce cas car l'atmosphère pourra en permanence être "alimenté" en énergie à la surface de l'océan. Cependant le fait que la trajectoire ne soit pas significativement différente en mode forcé et en mode couplé (voir la figure 6.8) suggère que la trajectoire du cyclone est principalement "guidée" par les vents grande échelle. De plus, en mode forcé, le champ de température de surface a une résolution grossière, il ne présente donc pas de forts gradients horizontaux, on peut donc imaginer que ce seront principalement les vents qui influenceront sur la trajectoire.

En ce qui concerne les simulations couplées les résultats suggèrent que le fait de mener l'algorithme à convergence a un effet stabilisant. Tout du moins nous remarquons que plus on avance dans le temps de simulation, plus les différences sont marquées entre les différentes stratégies de couplage au niveau de l'intensité des vents et de la température de surface. Ceci peut correspondre aux prémisses d'une dérive due à une accumulation d'erreurs dans le temps pour les simulations où l'on effectue seulement une ou deux itérations sur chaque fenêtre. On peut également remarquer que dans un premier temps (jusqu'à 160°E) la trajectoire n'est pas trop éloignée de la trajectoire observée du cyclone. Cependant, à partir du moment où le cyclone entame sa descente vers le sud (vers la Nouvelle-Calédonie) les trajectoires dévient significativement. Il est possible d'avancer une explication en accord avec ce que nous disions auparavant par rapport au champs de température de surface à l'instant initial. En effet, on voit d'après la figure 6.7 que la répartition spatiale de la température de surface

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

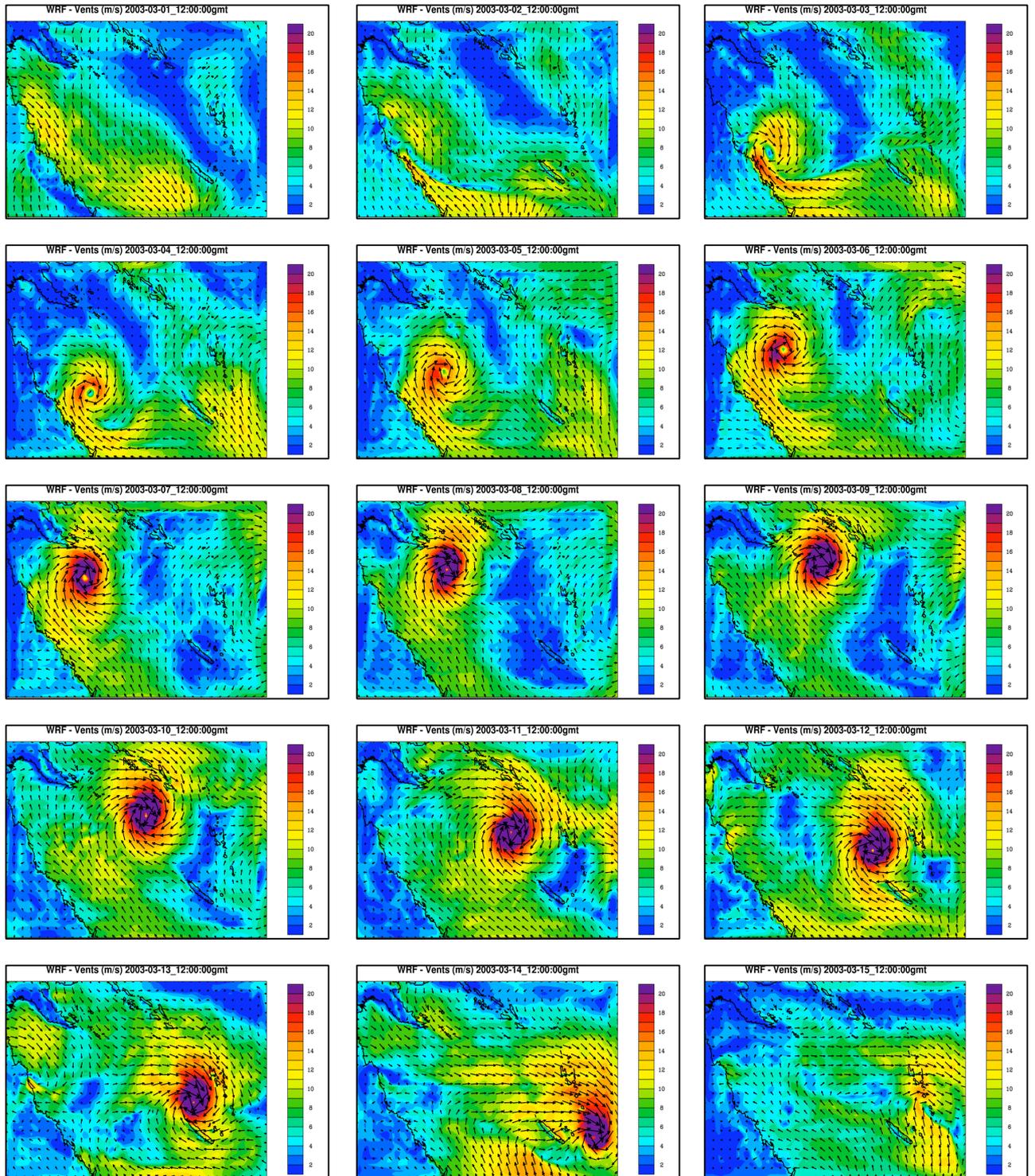


Fig. 6.4: Champs de vent à 10 mètres instantanés à 12h entre le 01/03/2003 et le 15/03/2003. (de gauche à droite et de haut en bas)

6.3 Une application avec des modèles réalistes

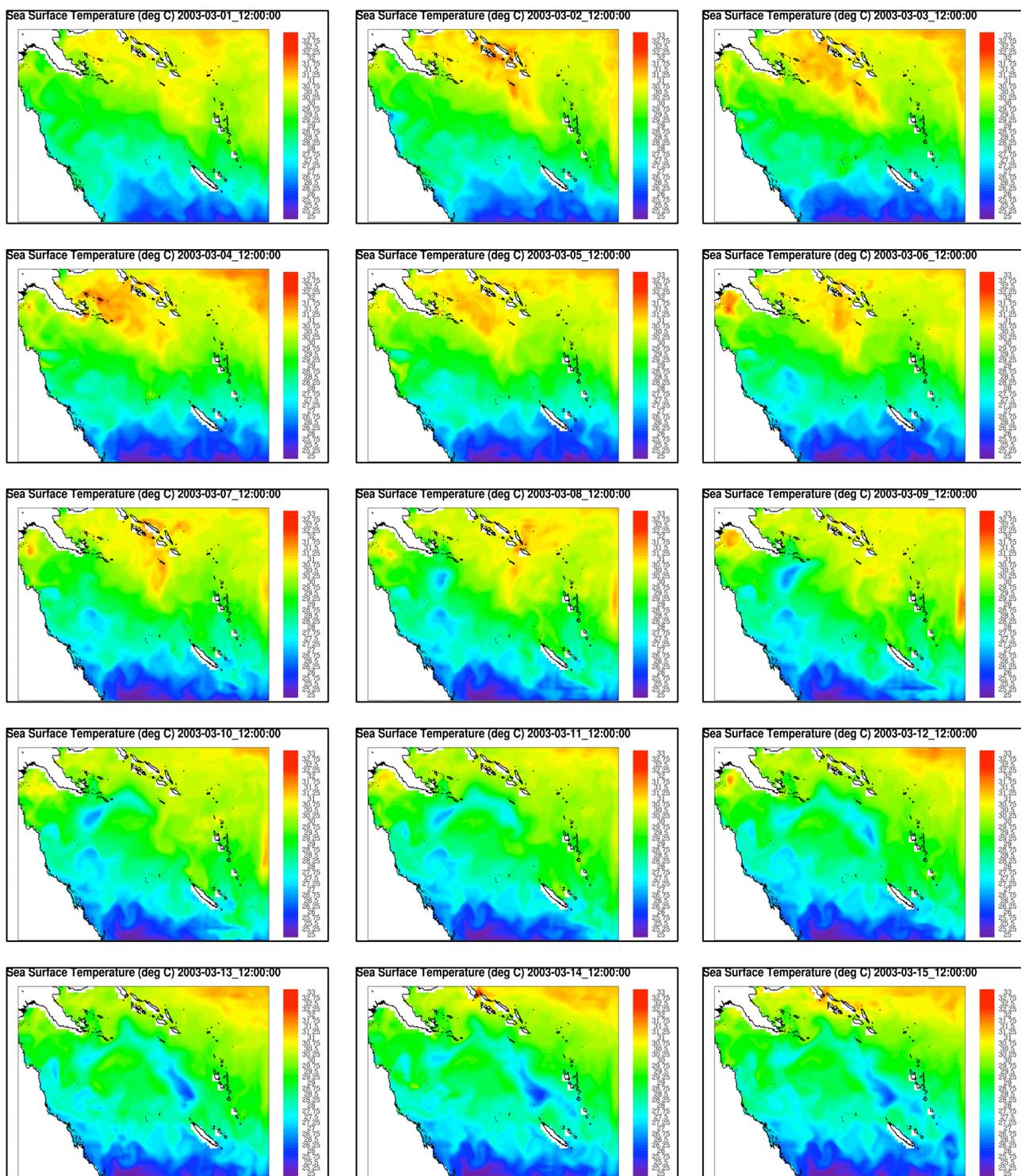


Fig. 6.5: Champs de température de surface de l'océan à 12h entre le 01/03/2003 et le 15/03/2003.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

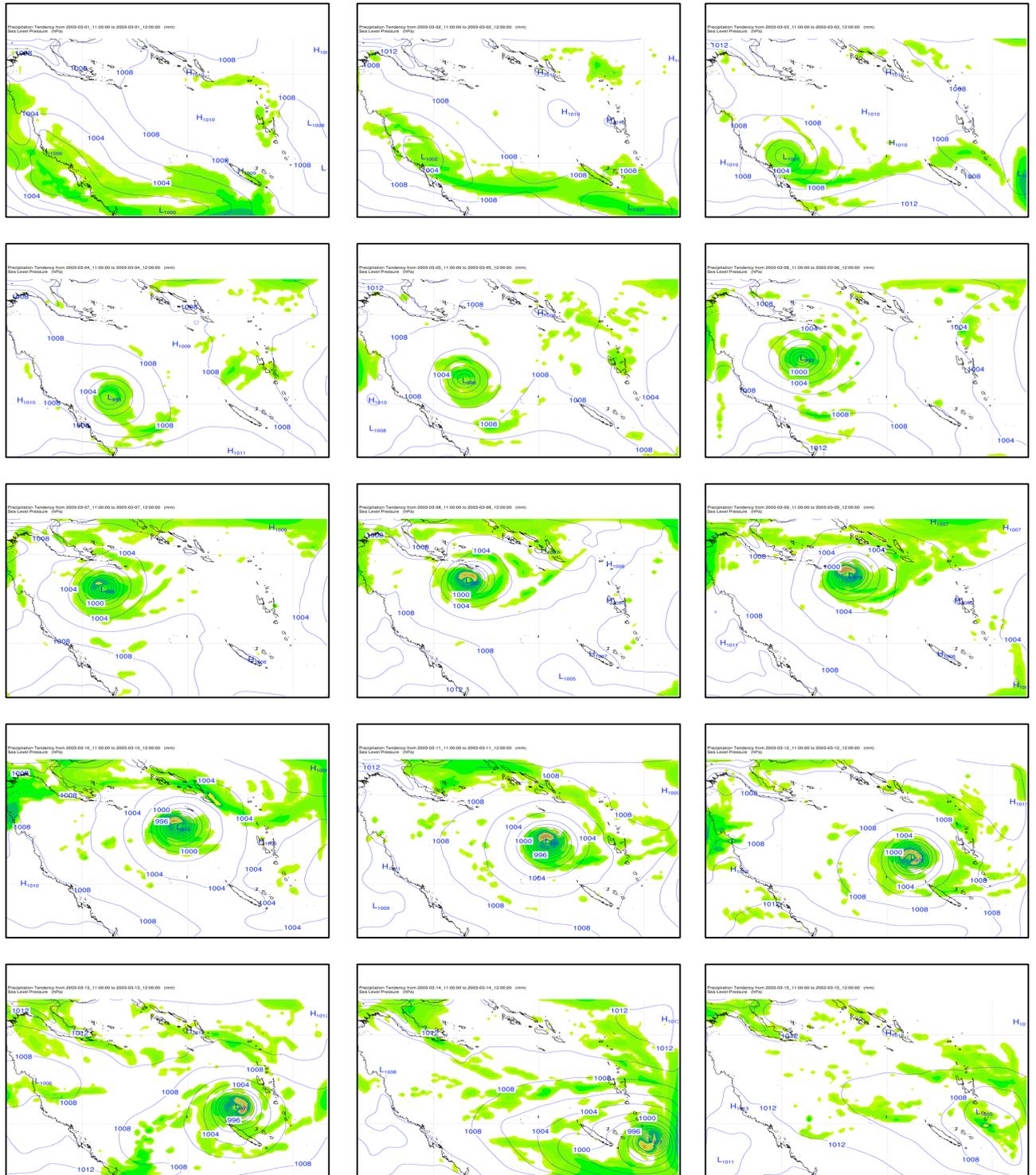
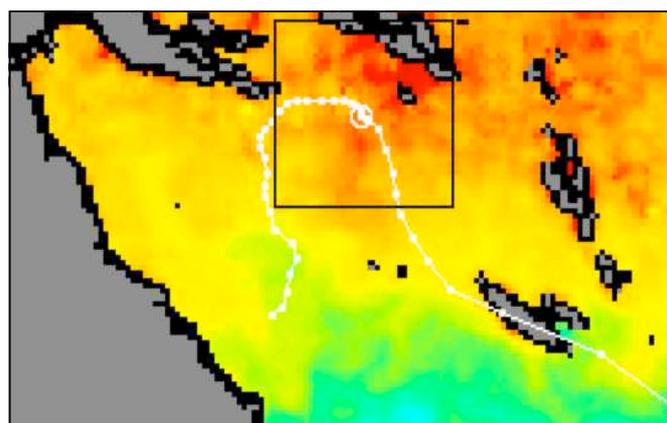


Fig. 6.6: Précipitations cumulées sur une heure et pression au niveau de la mer à 12h entre le 01/03/2003 et le 15/03/2003.

6.3 Une application avec des modèles réalistes

Sea Surface Temperature (MW OI: AMSR-E + TMI) 2003-Mar-10



Sea Surface Temperature (MW OI: AMSR-E + TMI) 2003-Mar-14

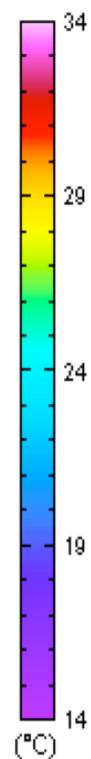
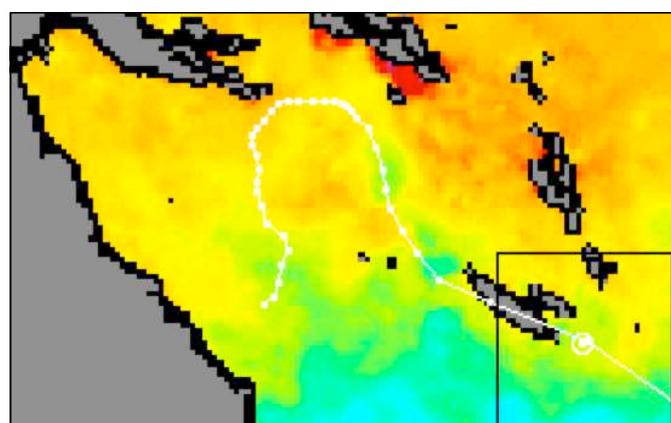


Fig. 6.7: Champs de température de surface de l'océan reconstitués à partir d'observations (source : <http://www.ssmi.com/>). L'image du haut représente la température pour le 10/03/2003 et celle du bas correspond à la température le 14/03/2003 lorsque le cyclone a dépassé la Nouvelle-Calédonie.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

Track of Hurricane Erica (2003)

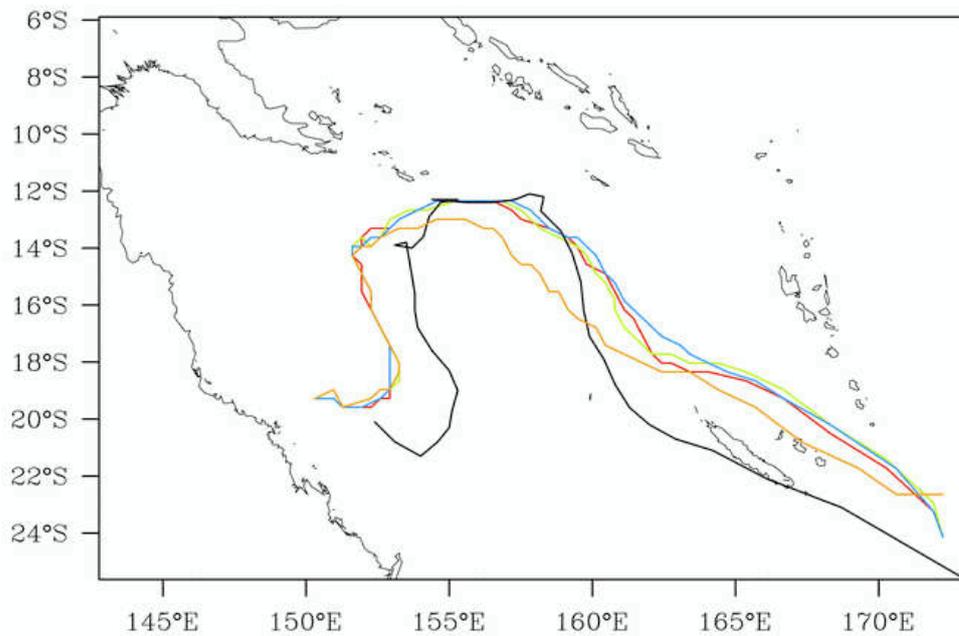


Fig. 6.8: Trajectoire du cyclone obtenue par différentes simulations. La trajectoire en noir correspond à la trajectoire observée du cyclone, celle en orange est celle fournie par le mode forcé. Ensuite, en mode couplé, la trajectoire en bleu correspond à la solution convergée, celle en rouge à la solution en effectuant une unique itération et celle en vert à la solution en effectuant deux itérations sur chaque fenêtre de temps.

6.3 Une application avec des modèles réalistes

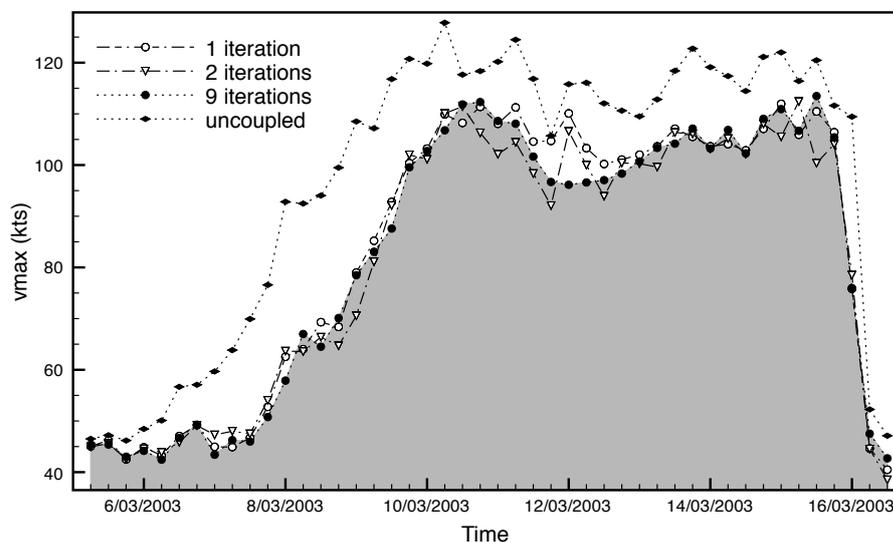


Fig. 6.9: Evolution de l'intensité du vent à 10 mètres (en noeuds) le long de la trajectoire du cyclone en fonction du temps. La surface grisée correspond à la simulation convergée. On remarque que le mode forcé est très au dessus des simulations couplées au niveau de l'intensité des vents.

de l'océan observée est différente de celle que l'on retrouve en pratique dans notre simulation au moment où le cyclone part vers le sud. Or, un cyclone lors de son déplacement "recherche" les zones où il pourra récupérer de l'énergie, ces zones correspondent typiquement à celles dont la température de l'eau en surface est élevée. Ceci pourrait expliquer, en partie, le fait que le cyclone parte vers l'est. Pour confirmer cette hypothèse il faudrait réaliser des tests de sensibilité de la trajectoire du cyclone au champs de température de surface de l'océan. Comme les masses d'eau chaude ne sont pas bien positionnées dans notre simulation on peut supposer que le cyclone ira chercher de l'énergie ailleurs, ce qui donnera une trajectoire différente de celle observée.

Pour terminer nous nous intéressons plus spécifiquement à l'évolution de la solution au cours des itérations. Pour ce faire nous définissons sur chaque fenêtre de temps $[t_i, t_{i+1}]$ à une itération k la quantité $d_i^k = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\langle SST_j \rangle_i^k - \langle SST_j \rangle_i^{k=9})^2}$ où $\langle SST_j \rangle_i$ correspond à

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

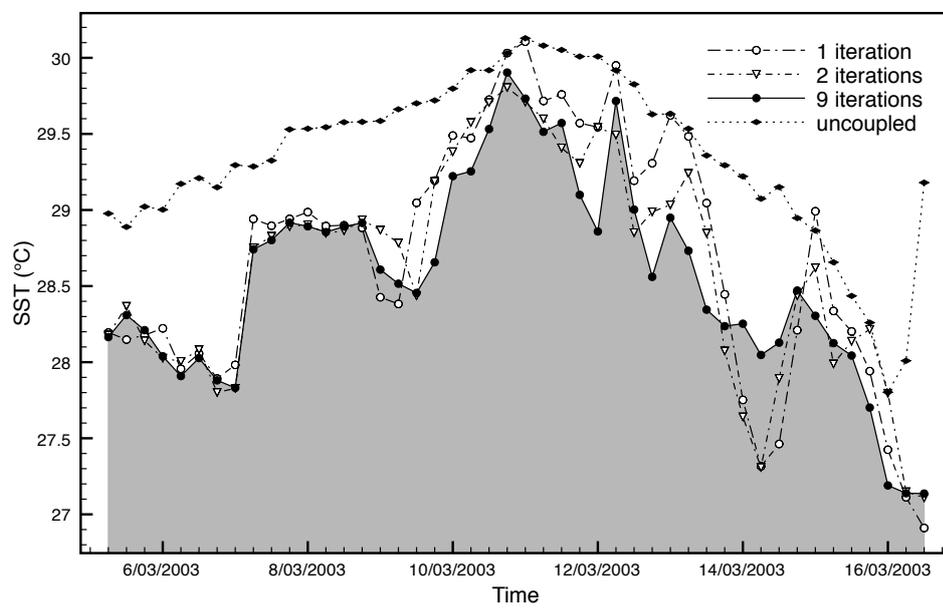


Fig. 6.10: Evolution de la valeur de la température de surface de l’océan (en °C) le long de la trajectoire du cyclone en fonction du temps. Pour le mode non couplé, la SST correspond à celle fournie par la réanalyse NCEP2. La surface grisée correspond à la simulation convergée.

6.3 Une application avec des modèles réalistes

la température de surface de l'océan moyenne sur $[t_i, t_{i+1}]$ au point j . Les termes d_i^k peuvent être vus comme l'évolution de l'erreur en fonction des itérations de Schwarz k , en considérant que la solution du modèle couplé après 9 itérations est la "vraie" solution. La figure 6.11 représente l'évolution pour chaque fenêtre de temps de la quantité d_i^k . Les résultats montrent que de manière robuste, sur chaque fenêtre temporelle, trois itérations sont suffisantes pour obtenir une bonne approximation de la solution convergée (à 10^{-4}°C près). Quelle que soit la fenêtre temporelle considérée, on remarque que l'évolution de l'erreur entre deux itérations successives est quasiment identique, ce qui suggère que la convergence est peu sensible à la condition initiale sur chaque fenêtre. Sans passer par des méthodes d'optimisation de convergence, nous remarquons donc les bonnes propriétés de convergence de l'algorithme de Schwarz dans un cadre réaliste. Cependant, de façon pratique, on pourra souhaiter se limiter uniquement à deux itérations de la méthode pour conserver un coût de calcul acceptable. La question est alors de savoir si la seconde itération modifie significativement le résultat de la première. D'après les divers résultats obtenus ici il apparaît que la troisième itération semble la plus importante. A terme l'objectif sera alors d'étendre le travail théorique réalisé dans ce document pour optimiser l'échange d'informations entre les modèles et ainsi pouvoir se contenter de deux uniques itérations de la méthode.

6. VERS UN ALGORITHME MATHÉMATIQUEMENT ET PHYSIQUEMENT CONSISTANT

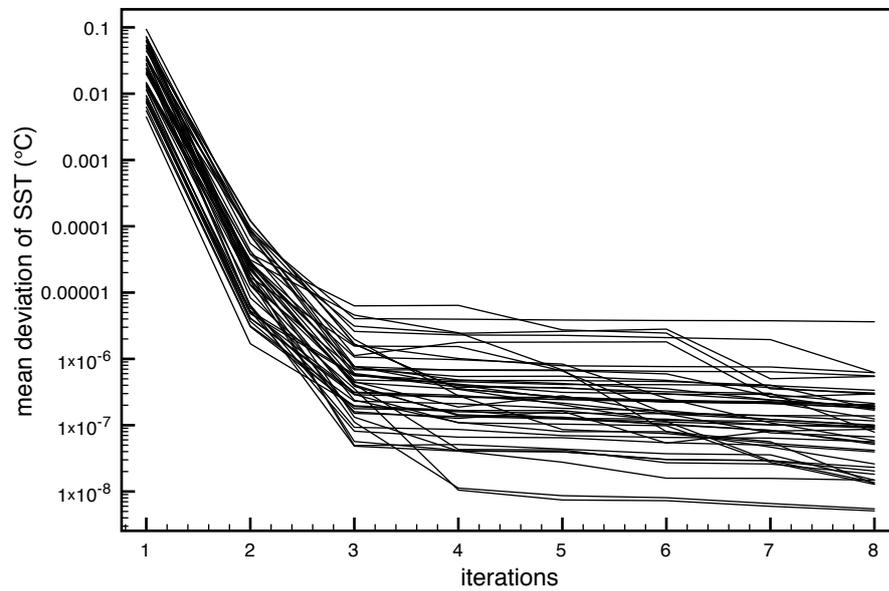


Fig. 6.11: Evolution de la valeur de d_i^k en fonction des itérations k , pour chaque fenêtre de temps $[t_i, t_{i+1}]$.

Conclusion et perspectives

Au cours du travail de recherche présenté dans ce manuscrit, nous avons étudié la possibilité d'appliquer l'algorithme de Schwarz global en temps au couplage des modèles numériques de l'océan et de l'atmosphère. Nous avons ensuite validé cette approche sur un cas-test réaliste.

L'étude en amont de ce travail a consisté en une analyse approfondie de la problématique océan-atmosphère, principalement d'un point de vue physique, afin de pouvoir poser clairement le problème de couplage. Nous avons également, dans le but de mieux appréhender ce problème, fourni une description synoptique de la modélisation de l'océan et de l'atmosphère.

Ensuite, sur un problème simplifié de diffusion, nous avons étudié de façon théorique ce couplage avec une physique idéalisée. Nous avons pu, dans ce cadre, mener une étude de convergence de l'algorithme de Schwarz correspondant. Cette étude nous a notamment permis d'obtenir analytiquement une approximation d'ordre 0 des conditions absorbantes. Nous avons également mis en évidence l'influence de la discontinuité des coefficients de diffusion à l'interface et des échelles temporelles considérées sur les propriétés de convergence.

Le problème à coefficients constants a ensuite été étendu dans un cas plus réaliste avec des coefficients de diffusion donnés par des paramétrisations usuelles de couches limites. Ceci a été fait en proposant une approche nouvelle d'estimation des erreurs à chaque itération de la méthode. Cette étude nous a permis de mettre en avant l'impact de la variabilité des coefficients sur la convergence de l'algorithme. Pour des coefficients dont le profil est parabolique (comme c'est le cas dans les couches limites de l'océan et de l'atmosphère), nous avons notamment montré que la vitesse de convergence, habituellement lente pour les basses fréquences, demeurait quasi-indépendante des fréquences temporelles considérées. De plus nous avons établi qu'avec les grandeurs caractéristiques rencontrées dans le cas du couplage océan-atmosphère, le taux de convergence était indépendant du type de conditions

Conclusion et perspectives

limites imposées au fond de l'océan et au sommet de l'atmosphère. Ces études théoriques, réalisées dans un cadre plus général que celui du couplage océan-atmosphère, ont permis de compléter notre connaissance des propriétés de convergence des méthodes de Schwarz dans des cas encore peu étudiés.

Nous nous sommes efforcés ensuite de faire la transition entre l'étude théorique sur l'algorithme de Schwarz et le problème de couplage océan-atmosphère. Cependant, dès que l'on prend en compte les paramétrisations physiques de calcul des flux air-mer le problème devient extrêmement compliqué. En effet, non seulement on ne connaît pas avec précisions tous les phénomènes physiques dès que l'on s'approche de l'interface air-mer mais la façon dont sont évalués les flux ne permet pas de faire l'analogie avec l'étude menée avec des conditions de type *Robin-Robin*. Pour ces raisons, le problème de couplage se ramène alors à imposer l'égalité des flux verticaux donnés par une paramétrisation à l'interface. Nous avons concentré notre étude sur l'évaluation des méthodes usuelles de résolution de ce problème. Pour ce faire celles-ci ont été placées dans le cadre théorique de l'algorithme de Schwarz, ce qui a permis de montrer les points forts de notre approche. Nous avons également introduit, sans toutefois mener à bout le calcul, une potentialité intéressante de la méthode de Schwarz pour évaluer la compatibilité entre les paramétrisations de couche limite de l'océan et de l'atmosphère.

Ce travail est motivé par des applications réelles. En ce sens, l'application à des modèles réalistes a finalement été effectuée dans le cadre de la simulation du cyclone tropical Erica. Nous avons pu comparer les résultats physiques obtenus en menant notre algorithme à convergence avec ceux obtenus après une ou deux itérations. Cette simulation nous a permis de formuler quelques remarques importantes :

- De manière robuste, sur chaque fenêtre de temps, trois itérations semblent suffisantes pour atteindre un état convergé.
- Le fait de mener l'algorithme à convergence a un effet stabilisant car l'équilibre entre les modèles est obtenu. Si l'on procède seulement à une ou, à un degré moindre, deux itérations, le "choc" provenant du fait que les modèles ne soient pas équilibrés n'est pas "absorbé".

Ce travail constitue une étude préliminaire dont le but a été de montrer la pertinence de l'algorithme de Schwarz dans un nouveau contexte. Il peut naturellement être enrichi et nous

pouvons proposer plusieurs perspectives. Tout d'abord en ce qui concerne l'algorithme de Schwarz en lui-même, une piste intéressante, débutée de manière succincte dans ce manuscrit, est l'utilisation de méthodes de contrôle des paramètres de Robin. Ceci permet notamment une comparaison entre les paramètres optimaux trouvés sur le problème continu et ceux trouvés sur le problème discret. Les premiers tests ont montré, comme c'était prévisible, que les paramètres optimaux déterminés analytiquement sur un problème continu deviennent sous-optimaux au niveau discret. A terme cette méthodologie pourrait permettre de se limiter à deux itérations pour obtenir la convergence (ou au moins une très bonne approximation de celle-ci) de la méthode en utilisant uniquement une approximation d'ordre 0 des conditions absorbantes. On peut également envisager l'optimisation des paramètres de Robin directement sur le problème discrétisé.

Dans le contexte océan-atmosphère, il conviendrait de procéder à une évaluation plus approfondie de la solution physique du modèle couplé obtenue avec différentes approches algorithmiques. Ceci a été fait uniquement de manière superficielle dans ce manuscrit. Pour ce faire, une piste intéressante serait la mise au point d'un cas test idéalisé océan-atmosphère qui servirait de référence. Il existe un certain nombre de modèles couplés conceptuels conçus pour l'étude de processus physiques particuliers. Cependant ceux-ci ne sont pas représentatifs des problèmes que l'on rencontre avec des modèles réalistes. L'implémentation d'un tel cas-test n'est pas trivial, mais cela permettrait de proposer une base de comparaison entre les différentes stratégies de couplage. Nous avons fait le choix dans ce travail de proposer une application réaliste avec des modèles 3D pour juger de la viabilité de la méthode dans ce contexte, sans passer par ce type de cas-test simplifié. Les résultats obtenus confirment que la méthode est applicable car il y a bien convergence de l'algorithme dans des situations réelles. Il convient maintenant d'évaluer l'amélioration de la solution physique, dans un premier temps dans une situation idéalisée, lorsqu'on impose la consistance des flux à l'interface air-mer.

De manière plus générale les perspectives d'utilisation de la méthode de couplage proposée dans cette thèse sont également liées à l'évolution des connaissances et des paramétrisations physiques de la couche limite de surface. Cependant il est important de noter que le cadre théorique proposé est suffisamment flexible pour inclure un modèle de vague ou bien pour imposer la continuité des valeurs à l'interface air-mer lorsque la sous-couche visqueuse sera

Conclusion et perspectives

mieux connue. L'objectif sera ainsi d'être en mesure de traiter le "vrai" problème de couplage en assurant l'égalité des flux et des valeurs à l'interface. Dans ce cas l'utilisation de conditions de transmission de type Robin serait tout à fait appropriée et les travaux effectués dans la partie 2 seraient directement applicables. Le concept de *super-paramétrisation* récemment introduit par Grabowski (2001) va dans ce sens. Dans ce cadre, les paramétrisations "conventionnelles" sur un maillage grossier sont enrichies par des modèles résolvant explicitement la micro-échelle sur grille fine, ce qui permet une représentation plus précise des interactions entre les diverses échelles spatio-temporelles. Cette démarche a été suggérée notamment pour l'étude de la couche limite atmosphérique (Sullivan *et al.*, 1996). Ce type de stratégie a été dernièrement appliquée plus spécifiquement à la modélisation de la couche limite à l'interface air-mer (Ginis *et al.*, 2004) et un cadre plus théorique, d'un point de vue mathématique, a été proposé par Majda (2006). En s'appuyant sur les simulations LES de la couche limite marine déjà réalisées (McWilliams *et al.*, 1999) la mise au point d'une *super-paramétrisation* pourrait permettre une amélioration du calcul des flux air-mer pour des petites échelles temporelles.

Nous allons terminer ces perspectives par quelques remarques plus générales. Dans l'introduction de ce manuscrit nous avons mentionné trois méthodologies permettant, de notre point de vue, de contribuer à l'amélioration de la solution physique des modèles. Il s'agissait de l'assimilation de données, du raffinement de maillage et du couplage de modèles. L'utilisation de ces différentes méthodes n'est pas exclusive. A titre d'illustration, l'assimilation variationnelle de données dans les modèles emboîtés a été étudiée (Simon *et al.*, 2008, et Debreu *et al.*, 2008). En ce sens, la mise en place d'une formulation de l'assimilation variationnelle de données pour des modèles couplés pourrait permettre une avancée significative pour le développement de ces modèles à des fins opérationnelles notamment. Cette méthodologie permettrait non seulement d'améliorer l'initialisation des modèles couplés, mais une application au moins aussi intéressante serait également l'analyse de sensibilité par méthode adjointe. En effet, afin d'évaluer l'importance de la calibration des formules *bulk* et par extension l'impact des coefficients d'échanges sur la solution du modèle couplé, l'analyse de sensibilité constituerait un outil très puissant et une source d'information très riche. Pour rejoindre la remarque faite précédemment, l'existence d'un cas-test simplifié pourrait aussi s'avérer très utile pour ce type d'étude. Dans le même ordre d'idée, les modèles couplés emboîtés font actuellement l'objet d'une attention toute particulière dans le but de représenter et comprendre

Conclusion et perspectives

l'impact des phénomènes régionaux sur le climat global. Notons qu'il est d'ailleurs possible de formuler ce problème de couplage multi-niveaux dans le cadre de l'algorithme de Schwarz. Cependant ce type de couplage soulève un nombre important de problèmes d'un point de vue théorique : couplage de modèles hydrostatiques et nonhydrostatiques, rétroaction d'un modèle régional haute résolution vers un modèle global... Les études visant à compléter le couplage océan-atmosphère par du raffinement local de la résolution ou par des techniques d'assimilation de données peuvent donc constituer des évolutions à longs termes des travaux effectués.

Dans ce manuscrit nous nous sommes efforcés de fournir un cadre mathématique adéquat pour le couplage de modèles. De notre point de vue les méthodes de couplage ne doivent pas être regardées sous un aspect uniquement physique et informatique, l'apport des mathématiques demeure essentiel. Les outils informatiques de couplage sont souvent assimilés à des "algorithmes de couplage" alors qu'ils ne constituent "que" des outils permettant la mise en place d'une méthode donnée. Nous avons vu qu'il n'était pas aisé de faire les choses proprement d'un point de vue mathématique, mais l'approche qui consiste à revisiter des méthodes relativement empiriques sous un jour plus théorique permet de mieux évaluer le caractère bien fondé ou non de ces méthodes. Plus généralement, si le fait d'accroître la consistance entre les approches mathématiques et physiques permet à terme d'acquérir une meilleure connaissance de certains processus physiques encore mal connus alors notre objectif sera atteint.

Conclusion et perspectives

Références

- ARAKAWA, A. (1966). Computational design for long-term numerical integrations of the equations of atmospheric motion. *J. Comput. Phys.*
- BALLABRERA-POY, J., BUSALACCHI, A.J. & MURTUGUDDE, R. (2001). Application of a Reduced-Order Kalman Filter to Initialize a Coupled Atmosphere–Ocean Model : Impact on the Prediction of El Niño. *J. Climate*, **14**, 1720–1737.
- BAO, J.W., WILCZAK, J.M., CHOI, J.K. & KANTHA, L.H. (2000). Numerical simulations of air-sea interaction under high wind conditions using a coupled model : A study of hurricane development. *Mon. weather rev.*, **128**.
- BELJAARS, A.C.M. (1994). The parameterization of surface fluxes in large-scale models under free convection. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, **121**, 255–270.
- BJORHUS, M. (1995). On Domain Decomposition, Subdomain Iteration and Waveform Relaxation. *Dr. Ing. Thesis, Department of Mathematical Sciences, Norwegian Institute of Technology*.
- BLAYO, E. & DEBREU, L. (2005). Nesting ocean models. *In An Integrated View of Oceanography : Ocean Weather Forecasting in the 21st Century*, ed. by E. Chassignet and J. Verron, *Kluwer*..
- BOUGEAULT, P. & LACARRERE, P. (1989). Parameterization of orography-induced turbulence in a mesobeta–scale model. *Mon. Wea. Rev.*, **117**, 1872–1890.
- BRASSEUR, P., BALLABRERA-POY, J. & VERRON, J. (1999). Assimilation of altimetric data in the mid-latitude oceans using the SEEK filter with an eddy-resolving, primitive equation model. *J. Mar. Syst.*, **22**, 269–294.

RÉFÉRENCES

- BRESCH, D., GUILLÉN-GONZALEZ, F., MASMOUDI, N. & RODRIGUEZ-BELLÍDO, M.A. (2003). Uniqueness of solution for the 2D Primitive Equations with friction condition on the bottom. *Monografias del Semin. Matem. Garcia de Galdeano*, **27**, 135–143.
- BRYAN, F.O., KAUFFMAN, B.G., LARGE, W.G. & GENT, P.R. (1996). The NCAR CSM flux coupler. *NCAR Tech. Notes NCAR/TN-424+STR*, 50 pp.
- BRYAN, K. (1969). A numerical model for the study of the circulation of the World Ocean. *J. Comput. Phys.*, **4**, 347–376.
- BRYAN, K. & COX, M.D. (1968). A nonlinear model of an ocean driven by wind and differential heating : Parts i and ii. *J. Atmos. Sci.*, **25**, 945–978.
- BUCKINGHAM, E. (1914). On physically similar systems : illustrations of the use of dimensional equations. *Phys. Rev.*, **4**, 345–376.
- BUSINGER, J., WYNGAARD, J., IZUMI, Y. & BRADLEY, E. (1971). Flux-Profile Relationships in the Atmospheric Surface Layer. *J. Atmos. Sci.*, **28**, 181–189.
- CAI, X.C. (1991). Additive Schwarz algorithms for Parabolic Convection-Diffusion Equations. *Numer. Math.*, **60**, 41–61.
- CAILLEAU, S., FEDORENKO, V., BARNIER, B., BLAYO, E. & DEBREU, L. (2008). Comparison of different numerical methods used to handle the open boundary of a regional ocean circulation model of the Bay of Biscay. *Ocean Modelling*, **25**, 1–16.
- CHARTON, P., NATAF, F. & ROGIER, F. (1991). Méthode de décomposition de domaine pour l'équation d'advection-diffusion. *C. R. Acad. Sci.*, **313**, 623–626.
- CHELTON, D.B., ESBENSEN, S.K., SCHLAX, M.G., THUM, N., FREILICH, M.H., WENTZ, F.J., GENTEMANN, C.L., MCPHADEN, M.J. & SCHOPF, P.S. (2001). Observations of coupling between surface wind stress and sea surface temperature in the eastern Tropical Pacific. *J. Climate*, **14**, 1479–1498.
- CHEN, D., ZEBIAK, S.E., CANE, M.A. & BUSALACCHI, A.J. (1997). Initialization and Predictability of a Coupled ENSO Forecast Model. *Mon. Wea. Rev.*, **125**, 773–788.

RÉFÉRENCES

- DANABASOGLU, G., LARGE, W.G., TRIBBIA, J., GENT, P., BRIEGLER, B. & MCWILLIAMS, J.C. (2006). Diurnal coupling in the tropical oceans of ccs3. *Journal of climate*, **19**.
- DEBREU, L. & BLAYO, E. (2008). Two Way embedding methods : a review. *Ocean Dynamics, in press*.
- DEBREU, L., SIMON, E. & BLAYO, E. (2008). 4D variational data assimilation for locally nested models : optimality system and preliminary numerical results. *submitted to Int. Journal for Numer. Methods in Fluids*.
- DUBOIS, O. (2007). Optimized schwarz methods for the advection-diffusion equation and for problems with discontinuous coefficients. *Ph.D. thesis, McGill University*.
- EDSON, J., PALUSZKIEWICZ, T., SANDGATHE, S., VINCENT, L., GOODMAN, L., CURTIN, T., HOLLISTER, J. & COLTON, M. (1999). Coupled Marine Boundary Layers and Air-Sea Interaction Initiative : Combining Process Studies, Simulations and Numerical Models. *Office of Naval Research*.
- ENGQUIST, B. & MAJDA, A. (1977). Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Math. Comp.*, **31**, 629–651.
- FAIRALL, C.W., BRADLEY, E.F., GODFREY, J.S., WICK, G.A., EDSON, J.B. & YOUNG, G.S. (1996). Cool-skin and warm-layer effects on sea surface temperature. *J. of Geophys. Res.*, **15**, 1295–1308.
- FAIRALL, C.W., BRADLEY, E.F., HARE, J.E., GRACHEV, A.A. & EDSON, J.B. (2003). Bulk parameterization of air-sea fluxes : Updates and verification for the coare algorithm. *J. of Climate*, **16**, 571–591.
- GANDER, M.J. & GOLUB, G.H. (2003). A Non-Overlapping Optimized Schwarz Method which Converges with Arbitrarily Weak Dependence on h . *Proceedings of the 14th International Conference on Domain Decomposition, published by National Autonomous University of Mexico*, 281–288.
- GANDER, M.J. & HALPERN, L. (2003). Methodes de relaxation d'ondes pour l'équation de la chaleur en dimension 1. *C. R. Acad. Sci. Paris t. 336, Série I*, 519–524.

RÉFÉRENCES

- GANDER, M.J. & HALPERN, L. (2007). Optimized schwarz waveform relaxation for advection reaction diffusion problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **45**, 666–697.
- GANDER, M.J. & STUART, A.M. (1998). Space-Time Continuous Analysis of Waveform Relaxation for the Heat Equation. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **19**, 2014–2031.
- GANDER, M.J., HALPERN, L. & NATAF, F. (2001). Optimized Schwarz methods. In *T. Chan, T. Kako, H. Karawada, and O. Pironneay, editors, Twelfth International Conference on Domain Decomposition Methods, Chiba, Japan. Domain Decomposition Press.*, 15–28.
- GANDER, M.J., HALPERN, L. & NATAF, F. (2003). Optimal Schwarz Waveform Relaxation for the One Dimensional Wave Equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, **41**, 1643–1681.
- GANDER, M.J., HALPERN, L. & KERN, M. (2005). A schwarz waveform relaxation method for advection-diffusion-reaction problems with discontinuous coefficients and non-matching grids. *Proceedings of the 16th International Conference on Domain Decomposition Methods*.
- GINIS, I., KHAIN, A.P. & MOROZOVSKY, E. (2004). Effects of Large Eddies on the Structure of the Marine Boundary Layer under Strong Wind Conditions. *J. Atmos. Sci.*, **61**, 3049–3063.
- GRABOWSKI, W.W. (2001). Coupling cloud processes with the large-scale dynamics using the Cloud-Resolving Convection Parameterization (CRCP). *J. Atmos. Sci.*, **58**, 978–997.
- GRIFFIES, S.M. (2004). *Fundamentals of Ocean Climate Models. NJ : Princeton University Press, 518 pp.*
- GRIFFIES, S.M., PACANOWSKI, R.C., SCHMIDT, M. & BALAJI, V. (2001). Tracer Conservation with an Explicit Free Surface Method for z-Coordinate Ocean Models. *Mon. Wea. Rev.*, **129**, 1081–1095.
- HONG, S.Y. & PAN, H.L. (1996). Nonlocal Boundary Layer Vertical Diffusion in a Medium-Range Forecast Model. *Monthly Weather Review*, **124**, 2322–2339.

RÉFÉRENCES

- HÖGSTRÖM, U. (1988). Non-dimensional wind and temperature profiles in the atmospheric surface layer : A re-evaluation. *Boundary-Layer Meteorology*, 55–78.
- JACOBSON, M.Z. (2005). Fundamentals of atmospheric modeling, 2d ed. *Cambridge U. Press*, 813 pp.
- JAPHET, C. (1997). Conditions aux limites artificielles et décomposition de domaine : Méthode OO2 (Optimisée d'Ordre 2). Application à la résolution de problèmes en mécanique des fluides. *Tech. Rep. 373, CMAP (Ecole Polytechnique)*.
- JAPHET, C. & NATAF, F. (2000). The best interface conditions for domain decomposition methods : Absorbing boundary conditions. *Artificial boundary conditions, with Applications to Computational Fluid Dynamics Problems*, L. Tourrette eds.
- JONES, P.W. (1999). First- and Second-Order Conservative Remapping Schemes for Grids in Spherical Coordinates. *Monthly Weather Review*, **127**, 2204–2210.
- JOUANNO, J., SHEINBAUM, J., BARNIER, B., MOLINES, J.M., DEBREU, L. & LEMARIÉ, F. (2008). The mesoscale variability in the Caribbean Sea. Part I : Simulations and characteristics with an embedded model. *Ocean Modelling*, **23**, 82–101.
- KANARSKA, Y., SHCHEPETKIN, A.F. & MCWILLIAMS, J.C. (2007). Algorithm for non-hydrostatic dynamics in the Regional Oceanic Modeling System. *Ocean Modelling*, **18**, 143–174.
- KANTHA, L.H. & CLAYSON, C.A. (1999). Numerical Models of Oceans and Oceanic Processes. *Academic Press*.
- LARGE, W.G. (2005). Surface fluxes for practitioners of global ocean data assimilation. *In An Integrated View of Oceanography : Ocean Weather Forecasting in the 21st Century*, ed. by E. Chassignet and J. Verron, Kluwer..
- LARGE, W.G. & DANABASOGLU, G. (2006). Attribution and Impacts of Upper-Ocean Biases in CCSM3. *J. Climate*, **19**, 2325–2346.
- LARGE, W.G. & POND, S. (1981). Open Ocean Momentum Flux Measurements in Moderate to Strong Winds. *J. Phys. Oceanogr.*, **11**, 324–336.

RÉFÉRENCES

- LARGE, W.G. & POND, S. (1982). Sensible and Latent Heat Flux Measurements over the Ocean. *J. Phys. Oceanogr.*, **12**, 464–482.
- LARGE, W.G. & YEAGER, S.G. (2004). Diurnal to decadal global forcing for ocean and sea-ice models. *NCAR technical note*.
- LARGE, W.G., MCWILLIAMS, J.C. & DONEY, S.C. (1994). Oceanic Vertical Mixing : A Review and a Model with a Nonlocal Boundary Layer Parameterization. *reviews of geophysics*, **32**, 363–403.
- LE DIMET, F.X. (1982). A general formalism of variational analysis. *CIMMS Report Le-Dimet, F.X., Y.K. Sasaki, and L. White, : Dynamic initialization with filtering of gravity waves. CIMMS Report No. 40, Norman, OK 73019, 12 pages*.
- LEE, T., BOULANGER, J.P., FOO, A., FU, L.L. & GIERING, R. (2000). Data assimilation by an intermediate coupled ocean-atmosphere model : Application to the 1997-1998 El Niño. *Journal of Geophysical Research*, **105**, 26063–26088.
- LELARASMEE, E., RUEHLI, A. & SANGIOVANNI-VINCENTELLI, A. (1982). The waveform relaxation method for time-domain analysis of large scale integrated circuits. *IEEE Trans. on CAD of IC and Syst.*, **1**, 131–145.
- LEMARIÉ, F., DEBREU, L. & BLAYO, E. (2008a). Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients, Part 1 : the constant coefficients case. *submitted to SIAM Journal on Scientific Computing*.
- LEMARIÉ, F., DEBREU, L. & BLAYO, E. (2008b). Towards an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients, Part 2 : the variable coefficients case. *submitted to SIAM Journal on Scientific Computing*.
- LEMARIÉ, F., MARCHESIELLO, P. & DEBREU, L. (2008c). Global-in-time Schwarz method applied to Two-Way Ocean-Atmosphere coupling : a study of tropical cyclone Erica. *submitted to Geophysical Research Letter*.

RÉFÉRENCES

- LEREDDE, Y., DEVENON, J.L. & DEKEYSER, I. (1999). Turbulent viscosity optimized by data assimilation. *Ann. Geophys.*, **17**, 1463–1477.
- LIONS, J.L., TEMAM, R. & WANG, S. (1992a). New formulations of the primitive equations of atmosphere and applications. *Nonlinearity*, **5**, 237–288.
- LIONS, J.L., TEMAM, R. & WANG, S. (1992b). On the equations of the large-scale ocean. *Nonlinearity*, **5**, 1007–1053.
- LIONS, P.L. (1988). On the Schwarz alternating method I. In *First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, R. Glowinsky, G.H. Golub, G.A. Meurant, and J. Périaux, eds, Philadelphia, PA, 1–42.
- LIONS, P.L. (1990). On the schwarz alternating method III : a variant for nonoverlapping subdomains. In *Tony F. Chan, Roland Glowinski, Jacques Périaux, et Olof Widlund, Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, held in Houston, Texas, March 20-22.*
- LOUIS, J.F. (1979). A parametric model of vertical eddy fluxes in the atmosphere. *Boundary-Layer Meteorology*, **17**, 187–202.
- LYNCH, P. & HUANG, X.Y. (1992). Initialization of the HIRLAM Model Using a Digital Filter. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 1019–1034.
- MAJDA, A.J. (2006). Multiscale Models with Moisture and Systematic Strategies for Superparameterization. *J. Atmos. Sci.*, **64**, 2726–2734.
- MCWILLIAMS, J.C. (2007). *Fundamentals of Geophysical Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2006. 266 pp. ISBN 0521 85637X.
- MCWILLIAMS, J.C., MOENG, C.H. & SULLIVAN, P.P. (1999). Turbulent fluxes and coherent structures in marine boundary layers : Investigations by Large-Eddy Simulation. In *Air-Sea Exchange : Physics, Chemistry, Dynamics, and Statistics*, G. Geernaert, ed., 507–538.
- MONIN, A.S. & OBUKHOV, A.M. (1954). Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Akad. Nauk SSSR Geofiz. Inst.*

RÉFÉRENCES

- MULLER, H., DUMAS, F., BLANKE, B. & MARIETTE, V. (2007). High-resolution atmospheric forcing for regional oceanic model : the iroise sea. *Ocean Dynamics*, **57**, 375–400.
- NATAF, F., ROGIER, F. & DE STURLER, E. (1994). Optimal interface conditions for domain decomposition methods. *Tech. Rep. 301, CMAP (Ecole Polytechnique)*.
- NAVON, I.M. (2008). Data assimilation for Numerical Weather Prediction : a review. *To appear in Springer Book entitled " Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic, and Hydrologic Applications"*. Dr Seon Ki Park Editor..
- O'BRIEN, J.J. (1970). A note on the vertical structure of the eddy exchange coefficient in the planetary boundary layer. *J. Atmos. Sci.*, **27**, 1213–1215.
- OGURA, Y. & PHILLIPS, N.A. (1962). Scale Analysis of Deep and Shallow Convection in the Atmosphere. *J. Atmos. Sci.*, **19**, 173–179.
- PAGOWSKI, M. (2006). An iterative solution of flux-profile relationships in the surface layer for regional model applications. *Atmospheric Environment*, **40**, 6892–6897.
- PAULSON, C. (1970). The Mathematical Representation of Wind Speed and Temperature Profiles in the Unstable Atmospheric Surface Layer. *J. Appl. Meteor.*, **9**, 857–861.
- PELEN, H. (2008). Optimisation des conditions d'interface pour le couplage océan-atmosphère. *Rapport de stage Centrale Lyon*.
- PENVEN, P., MARCHESIELLO, P., DEBREU, L. & LEFEVRE, J. (2008). Software tools for pre-and post-processing of oceanic regional simulations. *Environmental Modelling and Software*.
- PERLIN, N., SKYLLINGSTAD, E.D., SAMELSON, R.M. & BARBOUR, P.L. (2007). Numerical simulation of air-sea coupling during coastal upwelling. *Journal of Physical Oceanography*, **37**.
- PETCU, M., TEMAM, R. & ZIANE, M. (2008). Mathematical problems for the primitive equations with viscosity. *In Handbook of Numerical Analysis. Special Issue on Some Mathematical Problems in Geophysical Fluid Dynamics*.

RÉFÉRENCES

- QUARTERONI, A. & VALLI, A. (1999). Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. *Oxford Science Publications*.
- SAGAUD, P., DECK, S. & TERRACOL, M. (2006). Multiscale and Multiresolution Approaches in Turbulence. *Imperial College Press*.
- SHCHEPETKIN, A.F. & MCWILLIAMS, J.C. (2005). The regional oceanic modeling system (ROMS) : a split-explicit, free-surface, topography-following-coordinate oceanic model. *Ocean Modelling*, **9**, 347–404.
- SHCHEPETKIN, A.F. & MCWILLIAMS, J.C. (2008). KPP revisited. *In preparation*.
- SIMON, E., DEBREU, L. & BLAYO, E. (2008). 4D variational data assimilation for locally nested models : complementary theoretical aspects and application to a 2D shallow water model. *submitted to Int. Journal for Numer. Methods in Fluids*.
- SKAMAROCK, W.C. & KLEMP, J.B. (2008). A time-split nonhydrostatic atmospheric model for weather research and forecasting applications. *Journal of Computational Physics*, **227**, 3465–3485.
- SKAMAROCK, W.C., KLEMP, J.B., DUDHIA, J., GILL, D.O., BARKER, D.M., WANG, W. & POWERS, J.G. (2005). A description of the advanced research wrf version 2. *NCAR Tech. Notes 468+STR*.
- SMAGORINSKY, J. (1963). General Circulation Experiments with the Primitive Equations, Part1 : The Basic Experiment. *Monthly Weather Review*, **91**, 99–152.
- SMAGORINSKY, J., MANABE, S. & HOLLOWAY, J.L. (1965). Numerical results from a nine-level general circulation model of the atmosphere. *Monthly weather review*, **93**, 727–767.
- SMITH, S.D. (1980). Wind stress and heat flux over the ocean in gale force winds. *J. Phys. Oceanogr.*, **10**, 709–726.
- SMITH, S.D., FAIRALL, C.W., GEERNAERT, G.L. & HASSE, L. (1996). Air-sea fluxes : 25 years of progress. *Boundary Layer Meteorology*, **78**, 247–290.

RÉFÉRENCES

- STULL, R.B. (1988). An introduction to boundary layer meteorology. *Kluwer Academic Publishers*.
- SUKHONOSOV, V.I. (1981). On the correctness of the three-dimensional problem of the ocean dynamics. *Mekhanic Neodnorodnoi Sploschnikh Sred, Siberian Depart. Akad. Nauk SSSR*, **52**, 119–126.
- SULLIVAN, P.P., MCWILLIAMS, J.C. & MOENG, C.H. (1996). A grid nesting method for large-eddy simulation of planetary boundary-layer flows. *Boundary-Layer Meteorology*, **80**, 167–202.
- TEMAM, R., LIONS, J.L. & WANG, S. (1995). Mathematical study of the coupled models of atmosphere and ocean. *J. Math. Pures Appl.*, **74**, 105–163.
- TENNEKES, H. (1973). The Logarithmic Wind Profile. *J. Atmos. Sci.*, **30**, 234–238.
- TOSELLI, A. & WIDLUND, O. (2004). Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory. *Springer Series in Computational Mathematics*.
- TREGUIER, A.M. (2005). Models of the ocean : which ocean? *In An Integrated View of Oceanography : Ocean Weather Forecasting in the 21st Century* , ed. by E. Chassignet and J. Verron, *Kluwer*..
- TROEN, I. & MAHRT, L. (1986). A simple model of the atmospheric boundary layer : Sensitivity to surface evaporation. *Bound.-Layer Meteorol.*, **37**, 129–148.
- VON STORCH, H., GÜSS, S. & HEIMANN, M. (1999). Das Klimasystem und seine Modellierung. *Springer*, 256pp.
- WHITE, L. (2007). Accuracy and consistency in finite element ocean modeling. *PhD Dissertation, Université catholique de Louvain*.
- WIRTH, A. & BARNIER, B. (2008). Mean Circulation and Structures of Tilted Ocean Deep Convection. *J. Phys. Oceanogr.*, **38**, 803–816.