



**HAL**  
open science

# Modélisation du transport d'espèces chimiques en période convective pour l'étude de la haute troposphère tropicale en Amérique du Sud

Jean-Michel Henriot

► **To cite this version:**

Jean-Michel Henriot. Modélisation du transport d'espèces chimiques en période convective pour l'étude de la haute troposphère tropicale en Amérique du Sud. Sciences de la Terre. Université d'Orléans, 2009. Français. NNT : 2009ORLE2007 . tel-00452647

**HAL Id: tel-00452647**

**<https://theses.hal.science/tel-00452647>**

Submitted on 2 Feb 2010

**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.

**ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES ET TECHNOLOGIES**

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE DE  
L'ENVIRONNEMENT ET DE L'ESPACE

**THÈSE** présentée par :

**Jean-Michel HENRIOT**

soutenue le : **20 mars 2009**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline/ Spécialité : **Physique et Chimie de l'Environnement**

**Modélisation du transport d'espèces chimiques en  
période convective pour l'étude de la haute troposphère  
tropicale en Amérique du Sud**

**THÈSE dirigée par :**

**Virginie MARECAL**  
**Michel PIRRE**

Chargée de Recherche, LPC2E  
Professeur Emérite, Université d'Orléans

**RAPPORTEURS :**

**Sylvie CAUTENET**  
**Georges DURRY**

Professeur, Université Clermont-Ferrand 2  
Professeur, Université de Reims

**JURY :**

**Sylvie CAUTENET**

Professeur, Université Clermont-Ferrand 2,  
Président du jury

**Georges DURRY**

Professeur, Université de Reims

**Karla LONGO**

Chercheur, CPTEC-INPE (Brésil)

**Virginie MARECAL**

Chargée de Recherche, LPC2E

**Michel PIRRE**

Professeur Emérite, Université d'Orléans



*A ceux que je connais, partis durant ces trois années et demi :*

*Marcel Barthélémy*

*André Feuillie*

*Paulette Henriot*

*Geneviève Maquin*

*Michel et Claire Nguyen-Phung*

*Jean Portmann*

*Michel Rebeaud*



## Remerciements

*Je remercie Pierre-Louis Blelly, directeur du LPCE, futur LPC2E, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire. Je remercie Michel Tagger, directeur du LPC2E, et Gilles Poulet, directeur adjoint, pour leur soutien lors de cette thèse et pour leur contribution à l'obtention de ce diplôme.*

*Je remercie Michel Pirre et Virginie Marécal, mes directeurs de thèse.*

*J'adresse mes remerciements à Sylvie Cautenet et Georges Durry qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de ce travail. Je suis également reconnaissant à Céline Mari et Karla Longo pour leur évaluation de ce travail.*

*Je remercie vivement Gwenaël, pilier indéfectible qui m'a soutenu tout au long de ces trois années et demi. Tu m'as permis de tenir bon et d'avancer, je t'en suis vraiment reconnaissant.*

*Je remercie également Natalie pour sa gentillesse et ses bons conseils qui m'ont bien aidé. Je regrette simplement de n'avoir pas pu aller jusqu'au bout de certaines idées!*

*Xavier et Aurélie se sont bien occupés de moi dans le cadre de la commission des thèses -et en dehors!-, je leur en suis très reconnaissant.*

*Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Jean-Pierre Chaboureau, du Laboratoire d'Aérodynamique, pour les précieux conseils qu'il a su prendre le temps de me prodiguer.*

*Un grand merci à Yassine, à Agnès et à Marco, qui ont bien voulu que je reste un peu avec eux dans leur bureau... Merci pour tous ces bons moments et pour toutes ces discussions! Les écureuils vous le rendront...(ou Sephiroth!)*

*J'ai également été bien entouré par les autres thésards du laboratoire. Merci à Mirvatte, Verónica, Grégory, Katia, Mostafa, Gaël, Frantisek, Lena. Je souhaite à Mirvatte que son nouveau départ lui apporte beaucoup!*

*Je suis reconnaissant aux anciens doctorants pour toute leur aide. Merci à Guillaume, Farida, Sandrine.*

*Merci à Christophe, Jean-Baptiste, Bertrand, Matthieu, Ismaël, Gilles, Florent, Claude, Laurent, Michel, Christelle, Frédérique, Alessandro, Robert, Alessandro, Ludovic, Valéry que j'ai souvent croisés au rez-de-chaussé.*

*Je remercie chaleureusement les membres de la Kafèt pour leur bonne humeur qui m'a souvent bien réconforté : Olivier, JYB, Stéphanie, Fatia, Fabrice, Pierre, Michel, Franck, Gábor, Julien, Guillaume, Séna, Matthieu, Antoine, Aude-Lyse, Dominique, Jean-Louis, Jürgen et tous ceux que j'ai déjà cités ou -à ma grande honte- oubliés.*

*Au cours de ma thèse, je n'ai pas échappé aux formalités administratives pour lesquelles j'ai été bien aidé et guidé. Merci à Isabelle, Corinne, Cécile, Fatia.*

*Merci à l'équipe ASR qui a su répondre à mes sollicitations et qui permet au parc informatique de fonctionner (à peu près) correctement!;*

*J'ai eu l'occasion durant ma thèse de partir au Brésil, où j'ai été particulièrement bien reçu par Saulo Freitas et Karla Longo. Je les en remercie sincèrement, ainsi que toutes les personnes que j'ai eu l'occasion de rencontrer (personnes du CPTEC, étudiants en résidence avec qui j'ai passé*

*de très bons moments, ...).*

*J'ai eu la chance pendant ma thèse d'exercer la fonction de moniteur. Merci à Michel Pirre pour m'avoir aiguillé vers cette possibilité. Je remercie Brahim Sarh pour son accueil chaleureux au sein de l'IUT d'Orléans où j'ai enseigné. Pour leur bonne humeur, leur aide et leur encadrement, je suis très reconnaissant à Loïc, Manu, Jean-Pierre du département Chimie, à Carole, Guylaine, Gérard, Sébastien et à tous les enseignants avec qui j'ai eu la chance de travailler dans ces départements.*

*Je remercie également les différents acteurs du CIES Centre, ainsi que mes collègues moniteurs.*

*Enfin, dans un registre plus personnel, je remercie mes parents et mes frères et soeurs (beaux ou non!) pour leur amour et leur soutien, ma famille, mes amis restés fidèles, en particulier Nono et Nans pour ces années à la fac et Emilie avec qui j'ai beaucoup partagé, et surtout Amélie, avec qui la vie est belle!*

*A tous, merci beaucoup!*

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
<b>I Contexte scientifique</b>	<b>13</b>
I.1 Structure de l’atmosphère terrestre . . . . .	15
I.1.1 La troposphère . . . . .	15
I.1.2 La stratosphère . . . . .	16
I.2 Circulation atmosphérique . . . . .	16
I.2.1 Circulation générale . . . . .	16
I.2.2 Convection tropicale . . . . .	16
I.2.3 Caractéristiques de la circulation atmosphérique en Amérique du Sud . . . . .	19
I.3 Transport des espèces chimiques dans les régions intertropicales . . . . .	21
I.3.1 Différences de composition chimique entre la troposphère et la stratosphère . . . . .	22
I.3.2 Impact de la convection profonde sur la composition de la TTL . . . . .	22
<b>II Outils numériques : CATT-BRAMS et C-CATT-BRAMS</b>	<b>25</b>
II.1 Introduction . . . . .	27
II.2 Le BRAMS . . . . .	27
II.2.1 Équations primitives . . . . .	27
II.2.2 Méthode de discrétisation . . . . .	29
II.2.3 Paramétrisations . . . . .	31
II.2.4 Conditions initiales et aux limites . . . . .	36
II.3 Le CATT-BRAMS . . . . .	39
II.3.1 Émissions . . . . .	40
II.4 Le C-CATT-BRAMS . . . . .	41
II.4.1 Préprocesseur : SPACK . . . . .	43
II.4.2 Le mécanisme chimique RACM . . . . .	43
II.4.3 Solveur . . . . .	44
II.4.4 Calcul des taux de photolyse . . . . .	45
II.4.5 Paramétrisations pour les espèces chimiques . . . . .	47
II.4.6 Conditions initiales et aux limites . . . . .	49
II.5 Contributions au C-CATT-BRAMS . . . . .	49
II.5.1 Cadastres d’émissions . . . . .	49
II.5.2 Validation et mise à jour de Fast J . . . . .	50
<b>III Mesures utilisées</b>	<b>57</b>
III.1 Mesures de la campagne coordonnée de 2004	
HIBISCUS-TROCCINOX-TROCCIBRAS . . . . .	59
III.1.1 Mesures HIBISCUS . . . . .	59
III.1.2 Mesures TROCCINOX . . . . .	60
III.1.3 Mesures TroCCiBras . . . . .	63
III.2 Produits satellitaires . . . . .	64
III.2.1 Taux de précipitations de TRMM et de GPCP . . . . .	64
III.2.2 Mesures de la concentration en monoxyde de carbone par MOPITT . . . . .	64

<b>IV Etude de la répartition du CO en période convective :</b>	
<b>analyse des résultats météorologiques</b>	<b>67</b>
IV.1 Objectifs scientifiques . . . . .	69
IV.2 Caractéristiques générales des simulations . . . . .	71
IV.2.1 Période simulée . . . . .	72
IV.2.2 Résolutions spatiale et temporelle . . . . .	72
IV.2.3 Initialisation des champs météorologiques et forçage . . . . .	73
IV.2.4 Paramétrisations utilisées . . . . .	74
IV.3 Description et analyse des résultats de la simulation de référence . . . . .	80
IV.3.1 Description . . . . .	80
IV.3.2 Analyse des résultats météorologiques . . . . .	90
<b>V Etude de la répartition du CO en période convective :</b>	
<b>transport du traceur CO</b>	<b>113</b>
V.1 Analyse des résultats pour le monoxyde de carbone . . . . .	115
V.1.1 État initial . . . . .	115
V.1.2 Comparaison aux données de MOPITT . . . . .	116
V.1.3 Comparaison aux mesures aéroportées . . . . .	124
V.1.4 Etude de deux vols . . . . .	137
V.1.5 Impact des paramétrisations des processus dynamiques . . . . .	146
V.2 Tests de sensibilité . . . . .	153
V.2.1 Champ de concentration initial . . . . .	153
V.2.2 Inventaires . . . . .	162
V.2.3 Temps de vie du CO . . . . .	166
<b>VI Premiers tests du modèle C-CATT-BRAMS</b>	<b>169</b>
VI.1 Description de la simulation . . . . .	171
VI.2 Analyse des résultats météorologiques . . . . .	173
VI.2.1 Taux précipitants . . . . .	173
VI.2.2 Comparaison aux radio-sondages . . . . .	179
VI.2.3 Comparaison aux mesures de $\mu$ -SDLA . . . . .	189
VI.2.4 Mesures aéroportées . . . . .	190
VI.3 Analyse des résultats chimiques . . . . .	194
VI.3.1 Comparaison aux sondes ozones . . . . .	194
VI.3.2 Comparaison aux mesures aéroportées . . . . .	198
VI.4 Conclusion . . . . .	206
<b>VII Conclusions et perspectives</b>	<b>207</b>

# Introduction

Depuis le début de l'ère industrielle, l'impact de l'Homme sur son environnement a fortement augmenté. La pollution engendrée est à l'heure actuelle un problème majeur à l'échelle planétaire. En premier lieu, elle affecte dans les premiers kilomètres de l'atmosphère la qualité de l'air que nous respirons. L'enjeu est tel que des outils de prévision de la qualité de l'air ont été mis en place et donnent lieu à une information médiatisée des risques de pics de pollution, en particulier de pollution à l'ozone troposphérique, gaz très corrosif dégradant les tissus pulmonaires lorsqu'il est inhalé. Cependant, cette pollution engendrée par l'Homme n'est pas uniquement confinée au bas de la troposphère, comme l'a montré la compréhension du phénomène de destruction de l'ozone stratosphérique aux pôles, lors du printemps polaire. En effet, cette destruction est liée à la présence dans la stratosphère polaire de polluants d'origine anthropique tels les chloro-fluoro-carbures. Or, ces polluants sont émis dans la basse troposphère aux moyennes latitudes et principalement dans l'hémisphère nord. Ainsi, bien que la troposphère et la stratosphère présentent des caractéristiques propres et sont séparées par la tropopause, il existe des voies de passage de l'une à l'autre. La principale de ces voies se trouve dans la zone intertropicale. Dans cette zone, la tropopause est une région de transition moins abrupte qu'aux moyennes latitudes. Cette zone particulière, la TTL (Tropical Tropopause Layer), est le principal sas d'entrée vers la stratosphère. Sa composition prend donc une importance particulière car déterminant les espèces injectées dans la stratosphère. La composition de la TTL est fortement influencée par la convection profonde tropicale, qui permet le transport rapide des espèces émises depuis la basse troposphère jusque dans la TTL.

La convection profonde tropicale représente donc le principal transport des espèces émises dans les basses couches vers la haute troposphère où elles peuvent ensuite atteindre la stratosphère. C'est un processus essentiel auquel de nombreuses études sont actuellement consacrées, tant sur le phénomène physique lui-même que sur ses différents impacts physiques et chimiques. Les outils utilisés pour ces études consistent d'une part en des mesures in-situ ou de télé-détection utilisant plusieurs plate-formes (satellite ou sous-ballons par exemple). D'autre part, les modèles numériques sont maintenant d'un usage fréquent. Ils regroupent l'ensemble de nos connaissances sur l'atmosphère traduites sous la forme d'équations mathématiques ou de relations empiriques. Les modèles numériques atmosphériques permettent notamment de vérifier la validité des hypothèses faites et l'état de la connaissance générale de l'atmosphère en confrontant les résultats des modèles aux mesures. Mesures et modélisation sont complémentaires. D'une part, les modèles utilisent les données pour la validation des résultats de simulations. D'autre part, les modèles peuvent être utilisés pour aider à l'interprétation des données. Les modèles permettent effectivement d'élargir la vision de l'atmosphère fournie par les mesures : le domaine spatio-temporel couvert par les modèles est plus grand, et toutes les grandeurs physiques représentatives de l'atmosphère sont accessibles lors d'une simulation.

Les travaux présentés dans ce manuscrit s'inscrivent dans le cadre des études consacrées à la convection. L'approche choisie est l'utilisation d'un modèle numérique 3D méso-échelle à aire limitée, le CATT-BRAMS. Ce modèle offre la possibilité d'étudier le transport de traceurs, en l'occurrence le monoxyde de carbone (CO). Pour analyser les résultats fournis par ce modèle, nous disposons de mesures acquises durant la campagne coordonnée TROCCINOX-HIBISCUS-TROCCIBRAS de 2004 dans l'état de São Paulo au Brésil. L'objectif de ces travaux est triple. D'une part, le CATT-BRAMS offre la possibilité d'étudier l'impact du transport convectif sur la répartition du CO dans l'atmosphère et plus particulièrement dans la haute troposphère. D'autre

part, l'étude effectuée complète celle de Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) menée en saison sèche. Enfin, un nouveau modèle avec chimie, le C-CATT-BRAMS, est en fin de développement. Ce nouveau modèle utilisant le même schéma de transport que le CATT-BRAMS, l'étude menée avec ce dernier permet de s'assurer de la bonne représentation du transport d'espèces par la partie météorologique du modèle.

Dans le chapitre I, nous présentons tout d'abord la structure de l'atmosphère et la circulation générale s'y déroulant, ainsi que les spécificités de la zone intertropicale. Dans le chapitre II, nous décrivons les outils d'étude utilisés : le modèle CATT-BRAMS. Les différentes mesures utilisées (mesure de taux précipitants accumulés, mesures météorologiques et de monoxyde de carbone) sont décrites dans le chapitre III. Puis nous présentons dans le chapitre V l'étude de traceurs que nous avons réalisée. Enfin, les résultats préliminaires obtenus avec le nouveau modèle C-CATT-BRAMS sont présentés dans le chapitre VI.



---

---

## CHAPITRE I

---

# Contexte scientifique

---

**Table des matières**

---

<b>I.1</b>	<b>Structure de l'atmosphère terrestre . . . . .</b>	<b>15</b>
I.1.1	La troposphère . . . . .	15
I.1.2	La stratosphère . . . . .	16
<b>I.2</b>	<b>Circulation atmosphérique . . . . .</b>	<b>16</b>
I.2.1	Circulation générale . . . . .	16
I.2.2	Convection tropicale . . . . .	16
I.2.3	Caractéristiques de la circulation atmosphérique en Amérique du Sud .	19
<b>I.3</b>	<b>Transport des espèces chimiques dans les régions intertropicales . .</b>	<b>21</b>
I.3.1	Différences de composition chimique entre la troposphère et la stratosphère	22
I.3.2	Impact de la convection profonde sur la composition de la TTL . . . . .	22

---

## I.1 Structure de l'atmosphère terrestre

L'atmosphère terrestre est stratifiée. Les couches la composant sont (depuis le sol vers l'espace) : la troposphère, la stratosphère, la mésosphère, la thermosphère et l'exosphère. Ces couches et le profil de température correspondant sont montrées sur la figure I.1.1. La troposphère et la stratosphère concentrent à elles-seules environ 90% de la masse totale de notre atmosphère. Pour cette raison, un grand nombre de travaux se concentrent sur la compréhension de ces deux couches, des phénomènes s'y déroulant et des liens entre la troposphère et la stratosphère. La troposphère est la couche la plus proche de la surface et est le siège des phénomènes dynamiques les plus complexes tels les turbulences dans la couche limite ou la convection.

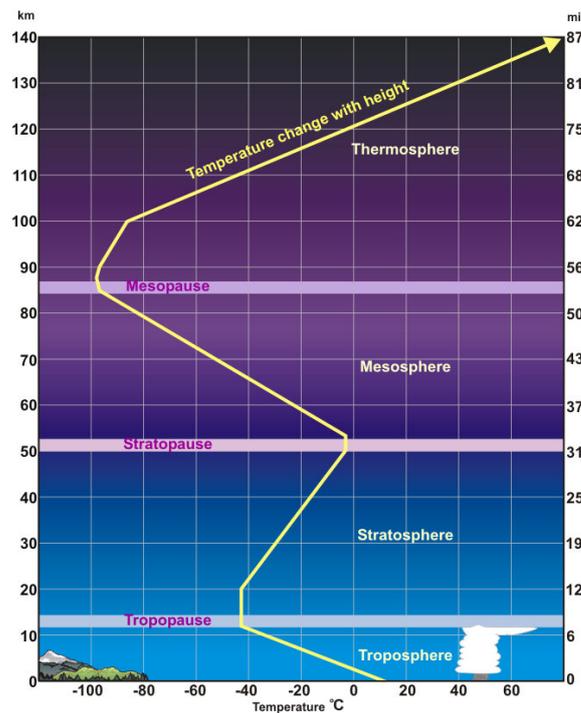


FIG. I.1.1 – Structure verticale générale de l'atmosphère terrestre. Image extraite du site <http://www.srh.noaa.gov>.

### I.1.1 La troposphère

La troposphère est la couche de l'atmosphère située entre le sol et environ 8 km (aux pôles) à 16 km (à l'équateur) d'altitude au sein de laquelle le gradient de température est négatif avec l'altitude. Elle est décomposée en deux sous-couches : la couche limite et la troposphère libre. La couche limite est la sous-couche de l'atmosphère subissant directement l'influence de la surface. Elle est donc très turbulente. Sa hauteur peut s'étendre jusqu'à environ 2 km. La troposphère libre est la sous-couche supérieure de la troposphère. Elle ne subit plus les frottements dus à la surface, ce qui permet une circulation des masses d'air sur de plus grandes distances. Au sommet de la troposphère se trouve la tropopause, dont plusieurs définitions peuvent être données. Elle est souvent définie comme l'altitude à laquelle la température est la plus basse (point froid). La définition donnée par la WMO (World Meteorological Organization) est l'altitude la plus basse

au-dessus de laquelle le gradient de température sur  $2\text{ km}$  est supérieur à  $-2^\circ\text{C}/\text{km}$ .

### I.1.2 La stratosphère

La stratosphère est située au-dessus de la tropopause. Elle s'étend jusqu'à environ  $50\text{ km}$ . Dans cette couche, le gradient de température est positif avec l'altitude, ce qui permet la stratification des masses d'air et un régime quasi-laminaire d'écoulement des masses d'air. La stratosphère présente également une particularité dans sa constitution chimique. Entre  $20$  et  $30\text{ km}$  se trouve la majeure partie de la couche d'ozone qui absorbe en très grande partie le rayonnement ultra-violet incident. C'est cette absorption réémise sous forme collisionnelle ou infra-rouge qui réchauffe l'air environnant. Cette couche d'ozone protège la vie des rayonnements nocifs et est donc particulièrement importante. De nombreux travaux ont eu et ont encore pour objet sa compréhension et celle des phénomènes qui y sont rattachés.

## I.2 Circulation atmosphérique

Les différentes couches de l'atmosphère ne sont pas totalement isolées les unes des autres. Il existe différentes circulations internes à chaque couche et permettant le passage d'une couche à l'autre, notamment entre la troposphère et la stratosphère.

### I.2.1 Circulation générale

La quantité d'énergie reçue est très importante près de l'équateur et beaucoup plus faible vers les pôles. La circulation atmosphérique tend à rétablir l'équilibre en transportant l'excès d'énergie reçu près de l'équateur vers les pôles. Pour cela se mettent en place plusieurs cellules d'ascendances et de subsidences associées à grande échelle au sein de la troposphère : la cellule de Hadley entre l'équateur et environ  $\pm 30^\circ\text{N}$ , relayée par la cellule de Ferrel qui s'étend jusqu'à environ  $\pm 60^\circ\text{N}$ , elle-même relayée par la cellule polaire terminant la chaîne vers les pôles. En altitude, à la jonction de deux cellules sont présents de forts vents zonaux, les courants jets (figure I.2.1).

Dans la stratosphère, la circulation suit un schéma différent cependant toujours lié au déséquilibre énergétique entre les pôles et l'équateur et à l'existence d'un pôle d'été et d'un pôle d'hiver. Dans le bas de la stratosphère, partant de l'équateur, les masses d'air s'écoulent vers les pôles. Dans la haute stratosphère et la mésosphère, la circulation se fait directement d'un pôle à l'autre, depuis le pôle d'été où le bilan radiatif est positif jusqu'au pôle d'hiver où le bilan radiatif est négatif. La figure I.2.2 montre la circulation générale en-dessous d'environ  $35\text{ km}$ .

### I.2.2 Convection tropicale

La convection est un phénomène que l'on retrouve dans la plupart des fluides géophysiques (magma terrestre, océans, atmosphère). La convection dans l'atmosphère est étudiée au moins depuis les années 50 (Scorer et Ludman 1953, Priestley et al 1954). Plusieurs types de convection ont pu être mis en évidence : la convection restreinte et la convection profonde.

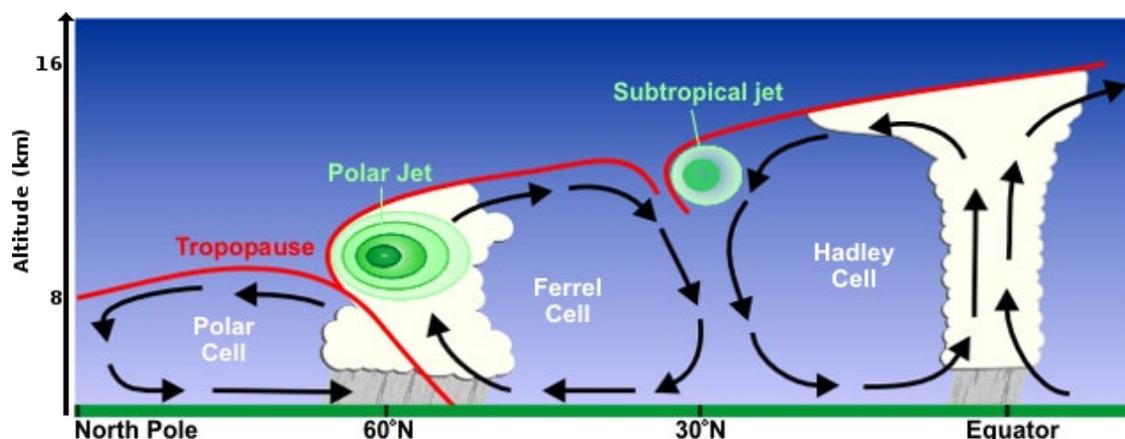


FIG. I.2.1 – Circulation globale dans la troposphère et emplacement des deux jets permanents. Figure extraite du site <http://www.srh.noaa.gov>.

### I.2.2.1 Convection restreinte

La convection restreinte est étudiée depuis plus d'une vingtaine d'année (Stull, 1985; Adrian *et al.*, 1986; Crum *et al.*, 1987). Un exemple typique de convection restreinte est un champ de cumulus de beau temps. Cette forme de convection est confinée dans la basse troposphère par une couche stable (Sorbján, 1996; Sullivan *et al.*, 1998). Elle peut atteindre 4 à 5 km d'altitude, relâchant dans le bas de la troposphère libre de l'air venant de la couche limite. L'interaction entre l'ascendance et la subsidence compensatoire n'est pas clairement établie à ce jour. Le schéma actuellement retenu est celui d'une ascendance bien localisée et une subsidence de faible intensité répartie de manière homogène à grande échelle (figure I.2.3 a). Ce schéma est cependant remis en cause par Jonker *et al.* (2008). Les auteurs proposent en effet un schéma dans lequel l'intensité de la subsidence compensatoire est forte près de l'ascendance et décroît fortement à mesure que l'on s'éloigne (figure I.2.3 b). La convection restreinte permet d'amincir la couche stable qui la bloque par l'apport d'eau condensée. Dans leur travaux, Khairoutdinov & Randall (2006) ont montré que la convection restreinte est également source de régions plus froides qui renforcent les subsidences. Par compensation, les ascendances entourées par ces régions plus froides gagnent en intensité.

### I.2.2.2 Convection profonde

L'amincissement de la couche stable et l'accroissement de l'intensité des ascendances peuvent mener, pour la convection continentale, au déclenchement souvent en fin de journée de la deuxième forme de la convection : la convection profonde. La convection profonde est générée par une instabilité suffisamment forte pour percer la couche stable. Elle se développe ponctuellement sur l'ensemble du globe, mais possède une intensité particulière dans la zone intertropicale. Des travaux montrent que les sorties des colonnes convectives aux latitudes tropicales atteignent en moyenne 200 hPa (environ 14 km) avec une température potentielle équivalente<sup>1</sup> proche de celle régnant au sommet de la couche limite planétaire (Highwood & Hoskins, 1998; Folkins *et al.*, 2000; Dessler, 2002). Cela indique qu'elle permet le transport rapide (en quelques heures) des masses d'air de la basse troposphère vers la haute troposphère où la turbulence générée permet le mélange de ces masses d'air avec l'air environnant. De manière générale, l'altitude atteinte par la convection profonde ne

<sup>1</sup>Température potentielle lorsque toute la chaleur latente a été libérée.

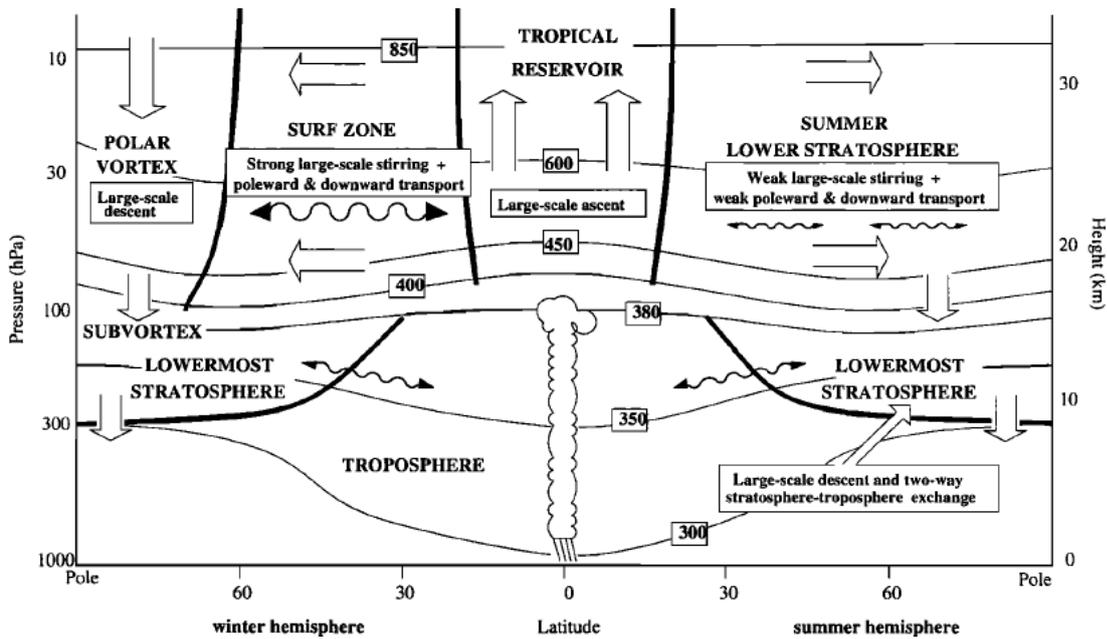


FIG. I.2.2 – Diagramme montrant les principaux transports et moyens de mélange entre la troposphère et la stratosphère. Les courbes fines montrent des surfaces isentropes sélectionnées labélisées par la température potentielle en degrés Kelvin. Les flèches larges indiquent le transport dans un plan méridien en moyenne zonale. Les flèches ondulantes indiquent le transport par diffusion le long des surfaces isentropes. Au dessus de 400 K, la stratosphère est divisée en différentes régions (le vortex polaire, la zone de transport rapide, le réservoir tropical et la stratosphère extra tropicale du côté été) par différentes barrières de transport par diffusion indiquées par les lignes en gras. En dessous de 400 K, l'atmosphère est séparée en troposphère et très basse stratosphère par une barrière correspondant à la tropopause extra tropicale. Cette partie de la stratosphère est accessible par le transport par diffusion le long des surfaces isentropes. Figure et légende extraites de Haynes & Shuckburgh (2000).

dépasse pas 140 hPa (Highwood & Hoskins, 1998). Cependant, il arrive que la convection dépasse la tropopause et pénètre ainsi directement dans la stratosphère, sans pour autant dépasser la tropopause de plus d'environ 1.5 km (Gettelman *et al.*, 2002). C'est le phénomène d'« overshoot ». Il existe une différence entre la convection au-dessus des continents et la convection au-dessus des océans. Au-dessus des continents, les ascendances sont plus fortes qu'au-dessus des océans (Alcala & Dessler, 2002) et atteignent généralement des altitudes plus élevées. Cependant, les cas d'« overshoot » sont possibles dans les deux situations et à l'heure actuelle le lieu où se situe le maximum d'occurrence des cas d'overshoot n'est pas encore bien défini.

A partir des températures de brillance provenant de mesures infra-rouge des données Global Cloud Imagery (GCI, Salby *et al.*, 1991) d'une résolution de 0.5° en longitude et en latitude, Gettelman *et al.* (2002) localisent l'activité convective la plus forte et atteignant les plus hautes altitudes au dessus du Pacifique Ouest et Centre en février et au dessus de la mousson indienne en août. A partir des données fournies par la mission TRMM sur 5 années, Liu & Zipser (2005) localisent au contraire ces maxima principalement au dessus de l'Afrique centrale, de l'Indonésie et de l'Amérique du Sud. Rossow & Pearl (2007) obtiennent des résultats similaires à ceux de Gettelman *et al.* (2002) à partir de 22 années de données infra-rouge et visible de l'ISCCP (International Satellite Cloud Climatology Project), la région où se produit le plus d'« overshoot » étant le Pacifique

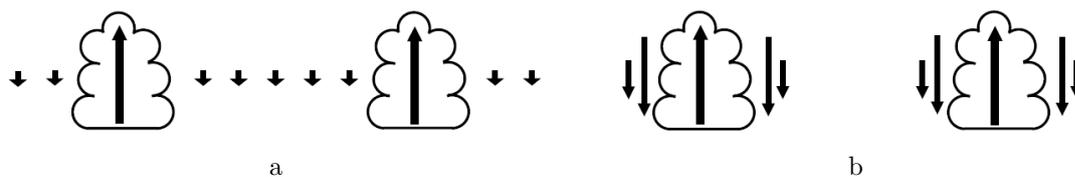


FIG. I.2.3 – Schémas possibles pour la répartition des subsidences compensatoires lors de phénomènes convectifs restreints. En (a) est montré le schéma classique et en (b) le schéma proposé par Jonker et al. (2008). Schémas tirés de Jonker et al. (2008).

Ouest. Les différences des résultats obtenus par Gettelman *et al.* (2002) et Liu & Zipser (2005) proviennent des méthodes de détection des altitudes de nuages propres à chaque jeu de données. TRMM est en effet sensible plutôt aux particules glacées précipitantes tandis que les produits basés sur les températures de brillance sont sensibles aux particules nuageuses. Zipser *et al.* (2006) argumente que l'origine des différences de résultats se comprend alors du fait des différences de forces des ascendances entre les continents et les océans : puisque les ascendances au dessus des continents sont plus fortes qu'au dessus des océans, les particules précipitantes atteignent également de plus hautes altitudes. La dimension horizontale des systèmes convectifs est également un facteur d'augmentation de la fréquence d'occurrence des cas d'overshoot (Rossow & Pearl, 2007).

### I.2.3 Caractéristiques de la circulation atmosphérique en Amérique du Sud

La circulation en Amérique du Sud est dominée par deux zones majeures de convergence, l'ITCZ (InterTropical Convergence Zone) et la SACZ (South Atlantic Convergence Zone), montrées sur la figure I.2.4. L'ITCZ donne lieu à la première bande de précipitation visible. Elle est située à proximité de l'équateur et couvre tout le périmètre terrestre. Le mouvement saisonnier de l'ITCZ suit celui du Soleil : elle se déplace vers le nord lors de l'été boréal et vers le sud lors de l'hiver boréal. Cette zone de convergence est responsable des saisons sèches et humide dans la zone intertropicale.

La deuxième bande visible au-dessus de l'Amérique du Sud sur la figure?? est la SACZ. C'est une bande convective dont l'origine se situe typiquement dans le bassin amazonien et qui s'étend vers le sud-est du Brésil jusqu'à la région subtropicale de l'océan Atlantique. Cette zone de convergence est toujours présente pendant l'été austral en Amérique du Sud mais son intensité est très variable (Ferreira *et al.*, 2004; Carvalho *et al.*, 2004). La description suivante de cette zone provient des études de Nogués-Paegle & Mo (1997) et de Liebmann *et al.* (2001), d'autres informations pouvant être trouvées dans Kodama (1992).

Les circulations de grande échelles associées à la SACZ sont influencées par le réchauffement local et par l'orographie et sont connectées aux oscillations tropicales intersaisonnières. L'orographie et la masse continentale importante aux latitudes tropicales permettent le développement de moussons avec des précipitations d'été très intenses centrées à approximativement 10°S. Le plateau bolivien, de largeur maximale à environ 18°S, constitue une source de chaleur sensible à haute altitude, bien que la chaleur latente libérée par la convection organisée apporte la plus forte contribution à la source de chaleur au-dessus de l'Amérique du Sud (Rao & Ergodan, 1989). L'effet de cette topographie, discuté par Meehl (1992) est dual. D'une part, le flux zonal dominant est

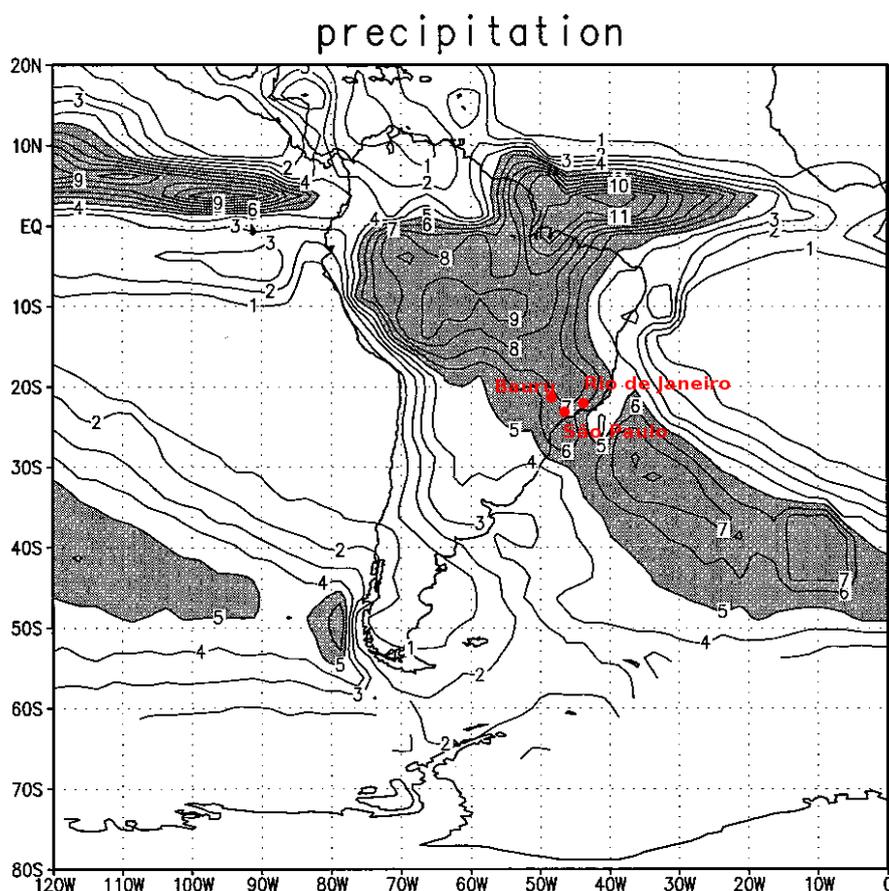


FIG. I.2.4 – Localisation des principales zone de déclenchement préférentiel de la convection profond à l'aide des précipitations moyennes. Figure extraite de citetnogues-paegleAmo1997. Les positions des trois principales villes citées dans ce manuscrit ont été reportées en rouge.

perturbé et d'autre part, le contraste thermique entre la terre et la surface maritime est accentué. Parmi les conséquences de ces effets, on peut noter l'anticyclone de haute altitude (Bolivian High) au-dessus du plateau bolivien et l'intensification du jet subtropical. L'étude de Liebmann *et al.* (2001) montre un flux entrant d'humidité depuis les tropiques vers l'Argentine et le sud du Brésil durant les périodes humides. Ce flux est causé par un fort jet de bas niveau à l'est des Andes, ce qui est en accord avec les résultats de Wang & Paegle (1996). Ce jet permet l'établissement de couloir d'humidité qui produisent les précipitations aux moyennes latitudes et aux latitude subtropicale durant l'été. La source d'humidité pour ce couloir est l'humidité apporté par les vents du nord la portant vers le sud à l'est des Andes. Ces vents provenant des terres au-dessus de l'Amérique du Sud, leur capacité de transport de l'humidité dépend du bilan d'humidité au-dessus de la partie tropicale de l'Amérique du Sud.

Concernant les variations intra-saisonniers de la SACZ, Liebmann *et al.* (1999) et Liebmann *et al.* (2001) montrent qu'elles sont le résultat de la propagation de perturbations originaires des moyennes latitudes. Les variations de la SACZ semblent également être liées à l'oscillation de Madden-Julian mise en évidence par Madden & Julian (1994) (Casarin & Kousky, 1986; Kiladis & Weickmann, 1992; Park & Schubert, 1993; Kousky & Kayano, 1994; Nogués-Paegle & Mo, 1997; Lenters & Cook, 1999; Paegle *et al.*, 2000). De plus, Kousky & Casarin (1986) ont relié le déficit

en précipitations au-dessus du sud du Brésil à un renforcement de la SACZ. L'extension vers le sud et le renforcement de la SACZ sont associés à une intensification de la convection tropicale dans le centre et l'est du Pacifique et à des conditions sèches dans le Pacifique Ouest et dans le continent maritime. La zone de convergence Sud Pacifique disparaît, de même que l'ITCZ du Golf de Mexico à l'Atlantique. L'étude de Nogués-Paegle & Mo (1997) évoque un motif oscillant de la SACZ avec une inversion de l'amplitude en approximativement 10 jours. Une forte activité convective au-dessus de la SACZ est associée à un déficit en précipitations au-dessus des plaines subtropicales de l'Amérique du Sud. A l'opposé, quand la SACZ faiblit, les précipitations au-dessus de ces plaines sont abondantes. Les résultats de cette étude sont en accord avec ceux obtenus par Kousky & Casarin (1986). Il est à noter que l'état de São Paulo est situé le plus au sud de la région sud-est du Brésil et est au sein de la zone de plus forte intensité convective de la SACZ (Nogués-Paegle & Mo, 1997) et que la SACZ a été reproduite à l'aide d'un modèle régional par Figueroa *et al.* (1995).

### I.3 Transport des espèces chimiques dans les régions inter-tropicales

La zone intertropicale est située entre environ  $-22$  et  $22^{\circ}\text{N}$  de latitude. Le rayonnement solaire incident étant pratiquement normal au sol, elle reçoit une plus grande partie de l'énergie solaire. Comme je l'ai déjà présenté dans la partie 1.2.1, ce déséquilibre provoque la mise en place de cellules de circulation de grande échelle. Cela confère aux régions intertropicales une importance particulière : elles sont situées au point de départ de la chaîne de circulation des masses d'air vers les pôles. La zone intertropicale est une zone où se développe préférentiellement la convection. Elle est en effet située à la base de la branche ascendante de la cellule de Hadley. Cette dernière s'étend le plus haut en altitude car la tropopause est la plus haute. Elle transporte l'air et les espèces chimiques de la basse troposphère tropicale vers la troposphère libre. Des travaux ont mis en évidence une couche particulière aux tropiques, située principalement autour de la tropopause (Highwood & Hoskins, 1998) entre environ  $355\text{ K}$  et  $400\text{ K}$  en température potentielle. Cette couche est appelée TTL (Tropical Tropopause Layer). On peut la définir comme une région présentant des caractéristiques à la fois troposphériques et stratosphériques. Elle s'étend donc de l'altitude à laquelle est rencontrée la première caractéristique stratosphérique et s'arrête à l'altitude où disparaît la dernière caractéristique troposphérique. Au sein de la TTL, la circulation verticale consiste principalement en une ascendance radiative lente. Horizontalement, la circulation est confinée méridiennement (principalement par les jets tropicaux), mais est présente à toutes les longitudes (Haynes & Shuckburgh, 2000). Un peu au-dessus de la TTL se trouve une zone de plus faible échange entre la stratosphère tropicale et la stratosphère des latitudes moyennes. Cette zone constitue le réservoir tropical. Sa perméabilité varie fortement au cours de l'année selon un cycle saisonnier. Entre les deux, de  $380$  à  $400\text{ K}$ , il existe une zone d'échange direct entre les latitudes tropicales et les latitudes moyennes. L'ensemble de la circulation atmosphérique dans la troposphère et dans la stratosphère est résumée sur la figure I.2.2.

### I.3.1 Différences de composition chimique entre la troposphère et la stratosphère

Il existe une barrière en terme de composition chimique mise en évidence par Folkins et al. (1999) grâce à des mesures de la concentration d’ozone. Cette chemopause serait située à environ 14 km et correspond à l’altitude à laquelle la concentration en ozone commence à augmenter. Au dessus de la chemopause, la concentration des espèces chimiques évolue rapidement vers des valeurs typiques de la stratosphère. La troposphère libre et la couche limite sont situées en-dessous de la chemopause et comportent entre elles des différences de composition chimique. La troposphère libre est relativement peu polluée. Le temps de vie des espèces y est relativement long. La couche limite est au contraire très polluée et homogène du fait de la turbulence qui y règne. La composition de la couche limite est directement influencée par les émissions. Une différence essentielle entre la troposphère et la stratosphère est que dans cette dernière, les polluants introduits ne peuvent pas produire d’ozone, dont la seule source est la photodissociation du dioxygène.

### I.3.2 Impact de la convection profonde sur la composition de la TTL

La convection profonde joue un rôle essentiel dans la redistribution des espèces chimiques au sein de l’atmosphère aussi bien localement qu’à plus grande échelle (cellules isolées ou systèmes organisés, phénomène de mousson). Si l’altitude maximale atteinte par la convection profonde est généralement de 14 km, l’influence sur la TTL dépasse cette altitude. En effet, en premier lieu, l’air des basses couches se mélange à l’air environnant et peut atteindre le seuil à partir duquel le bilan radiatif est positif et induit une ascendance lente des masses d’air. Ce seuil est situé vers 15 km (Gettelman *et al.*, 2004) mais est influencé par la couverture nuageuse (Sherwood *et al.*, 2003; Gettelman *et al.*, 2004; Corti *et al.*, 2005). Ainsi, la convection alimente la TTL en espèces chimiques troposphériques, ces dernières pouvant ensuite traverser la tropopause par transport quasi-horizontale le long des niveaux isentropes ou par ascendance radiative lente.

A partir des mesures des instruments ODIN, HALOE, MOPITT et MLS, Ricaud *et al.* (2007) ont étudié la répartition de  $N_2O$ ,  $CH_4$  et  $CO$  à 400 K en température potentielle. Ces travaux mettent en évidence une distribution de ces espèces possédant de forts gradient zonaux, les maxima de concentration étant localisés principalement au dessus de l’Afrique, mais également au dessus du nord de l’Amérique du Sud et de l’Asie du sud-est, selon les espèces. Cette répartition est lié d’une part au développement de la convection au-dessus des continent, mais également aux émissions plus fortes au-dessus de ceux-ci. L’influence de la convection ne se limite cependant pas à la redistribution des espèces chimiques ou à modifier le bilan radiatif (Nowicki & Merchant, 2004). La convection a également un impact sur la chimie via différents processus :

- l’absorption des espèces solubles par les gouttes de nuage et de pluie,
- la chimie en phase aqueuse dans ces gouttes,
- le lessivage de l’atmosphère par sédimentation des précipitations contenant des espèces chimiques,
- l’adsorption à la surface des cristaux de glace,
- la chimie hétérogène à la surface de ces cristaux,
- la production de  $NOx$  ( $NO + NO_2$ ) par les éclairs générés dans les nuages,
- le transport de la vapeur d’eau en altitude, source de  $HOx$  ( $OH + HO_2$ ) contrôlant le pouvoir

oxydant de l'atmosphère.

La convection est un phénomène très important pour le transport des espèces chimiques à laquelle ont été et sont encore consacrés actuellement de nombreux travaux (Par exemple Wong et al 1995, Folkins *et al.*, 2000; Mari *et al.*, 2000; Sherwood & Dessler, 2001; Cautenet *et al.*, 2001; Alcalá & Dessler, 2002; Dessler, 2002; Durrý *et al.*, 2006; Rivière *et al.*, 2006; Marécal *et al.*, 2006; Chaboureau *et al.*, 2007; Salzmán *et al.*, 2007; Grosvenor *et al.*, 2007; Barth *et al.*, 2007; Salzmán *et al.*, 2008). Son impact physico-chimique commence à être connu aussi bien localement (aux environs immédiats de la cellule convective) qu'à plus large échelle (TTL, transport dans la stratosphère), mais reste difficile à quantifier. Cela vient du faible nombre de mesures effectuées dans et autour de phénomènes convectifs. Les travaux consacrés au rôle de la convection sur les échanges d'espèces chimiques et de vapeur d'eau entre la troposphère et la stratosphère utilisent de nombreux outils : des mesures in situ ou de télédétection sur différentes plateformes (moyens sol, mesures ballons, avions et satellites) et différents modèles numériques.



---

---

## CHAPITRE II

---

### Outils numériques : CATT-BRAMS et C-CATT-BRAMS

---

**Table des matières**

---

<b>II.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>27</b>
<b>II.2</b>	<b>Le BRAMS</b>	<b>27</b>
II.2.1	Équations primitives	27
II.2.2	Méthode de discrétisation	29
II.2.3	Paramétrisations	31
II.2.4	Conditions initiales et aux limites	36
<b>II.3</b>	<b>Le CATT-BRAMS</b>	<b>39</b>
II.3.1	Émissions	40
<b>II.4</b>	<b>Le C-CATT-BRAMS</b>	<b>41</b>
II.4.1	Préprocesseur : SPACK	43
II.4.2	Le mécanisme chimique RACM	43
II.4.3	Solveur	44
II.4.4	Calcul des taux de photolyse	45
II.4.5	Paramétrisations pour les espèces chimiques	47
II.4.6	Conditions initiales et aux limites	49
<b>II.5</b>	<b>Contributions au C-CATT-BRAMS</b>	<b>49</b>
II.5.1	Cadastres d'émissions	49
II.5.2	Validation et mise à jour de Fast J	50

---

## II.1 Introduction

Les deux modèles utilisés pour effectuer les travaux présentés dans ce manuscrit sont les modèles CATT-BRAMS (Freitas *et al.*, 2007; Longo *et al.*, 2007) et C-CATT-BRAMS, tous les deux basés sur le modèle météorologique BRAMS. Dans cette partie, nous présentons d'abord le modèle BRAMS. Ensuite nous abordons les fonctionnalités supplémentaires des modèles CATT-BRAMS et C-CATT-BRAMS : respectivement le transport des traceurs et le modèle chimique. Enfin, je présenterai mes contributions aux C-CATT-BRAMS.

## II.2 Le BRAMS

Ce modèle est une version du modèle RAMS (Regional Atmospheric Modeling System, Cotton *et al.* 2003) spécialement adaptée pour les régions tropicales. Le RAMS est un modèle météorologique 2D/3D méso-échelle à aire limitée, non-hydrostatique, développé à l'Université d'État du Colorado (CSU : Colorado State University) en collaboration avec les chercheurs du laboratoire Mission Research Corporation (MRC) / ASTeR (Pielke *et al.*, 1992; Cotton *et al.*, 2003). Il est issu de la fusion d'un modèle de couche limite sèche (Pielke, 1974) et d'un modèle de nuage (Cotton *et al.*, 1982). Ce modèle a été validé à de nombreuses reprises (Cotton *et al.*, 2003) et est actuellement utilisé par de nombreux groupes dans le monde entier (<http://www.atmet.com/>).

Les développements effectués dans le BRAMS sont spécifiques aux tropiques. Ils concernent principalement les schémas convectifs, les cadastres de couverts végétaux et les données d'humidité du sol. Tout comme le RAMS, le BRAMS a été validé (Freitas *et al.*, 2007; Longo *et al.*, 2007) et est très utilisé<sup>1</sup>. C'est en particulier l'un des modèles opérationnels du CPTEC (Centre de prévision météorologique et d'études climatiques). Cet outil et ses dérivés CATT-BRAMS et C-CATT-BRAMS sont donc adaptés pour les études entreprises dans cette thèse.

### II.2.1 Équations primitives

Les équations primitives résolues par le modèle sont les équations non-hydrostatiques pour les fluides compressibles. Elles regroupent les lois de conservation de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la masse :

– *Équations du mouvement*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - w \frac{\partial u}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial x} + fv + \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)_{turb} \quad (\text{II.2.1})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - w \frac{\partial v}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial y} - fu + \left( \frac{\partial v}{\partial t} \right)_{turb} \quad (\text{II.2.2})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -u \frac{\partial w}{\partial x} - v \frac{\partial w}{\partial y} - w \frac{\partial w}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial z} - \frac{g\theta'_v}{\theta_0} + \left( \frac{\partial w}{\partial t} \right)_{turb} \quad (\text{II.2.3})$$

– *Équation thermodynamique*

$$\frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} = -u \frac{\partial \theta_{il}}{\partial x} - v \frac{\partial \theta_{il}}{\partial y} - w \frac{\partial \theta_{il}}{\partial z} + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{turb} + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{rad} + S + P \quad (\text{II.2.4})$$

<sup>1</sup>[http://meioambiente.cptec.inpe.br/modelo\\_cattbrams.html](http://meioambiente.cptec.inpe.br/modelo_cattbrams.html)

– Équation de continuité pour le rapport de mélange pour chaque catégorie  $n$  d'hydrométéores<sup>2</sup>

$$\frac{\partial r_n}{\partial t} = -u \frac{\partial r_n}{\partial x} - v \frac{\partial r_n}{\partial y} - w \frac{\partial r_n}{\partial z} + \left( \frac{\partial r_n}{\partial t} \right)_{turb} + \left( \frac{\partial r_n}{\partial t} \right)_{sedim} + S + P \quad (\text{II.2.5})$$

– Équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \pi'}{\partial t} = -\frac{R\pi_0}{c_v \rho_0 \theta_0} \left( \frac{\partial(\rho_0 \theta_0 u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_0 \theta_0 v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_0 \theta_0 w)}{\partial z} \right) \quad (\text{II.2.6})$$

Avec :

- $u$  : composante ouest-est du vent
- $v$  : composante sud-nord du vent
- $w$  : composante verticale du vent
- $f$  : paramètre de Coriolis
- $R$  : constante des gaz parfaits
- $\theta$  : température potentielle
- $\rho_0$  : densité de l'air de référence
- $\theta_0$  : température potentielle de référence
- $\theta_{il}$  : température potentielle de l'eau liquide et solide
- $r_n$  : rapport de mélange pour l'une des catégories suivantes : l'eau totale<sup>3</sup>, la pluie, les petits cristaux de glace, les agrégats, la neige, le grésil ou la grêle
- $g$  : accélération de la pesanteur
- $\theta'_v$  : température potentielle virtuelle
- $\pi_0$  : fonction d'Exner (pression réduite) de référence
- $\pi'$  : perturbation de la fonction d'Exner
- $S$  : terme générique pour désigner les sources
- $P$  : terme générique pour désigner les puits
- $c_v$  : capacité thermique à volume constant

La fonction d'Exner, également appelée pression réduite, est définie par :

$$\pi = \left( \frac{P}{P_0} \right)^{\frac{R}{c_p}} \quad (\text{II.2.7})$$

ou  $P$  est la pression utilisée,  $P_0$  la pression de référence (1000 hPa) et  $c_p$  la capacité thermique de l'air sec à pression constante. L'indice *turb* correspond au transport turbulent, l'indice *sedim* correspond à la sédimentation des hydrométéores précipitants et l'indice *rad* correspond aux tendances provenant des processus radiatifs. Les variables dans ces équations représentent des quantités moyennées sur le volume d'une cellule de la maille de calcul. Ces équations étant écrites pour des fluides compressibles, elles sont valides jusqu'à une cinquantaine de kilomètres d'altitude. L'approche utilisée pour le calcul de l'évolution de l'atmosphère est une approche par tendances. Les tendances dues à la dynamiques puis aux termes sources et puits sont calculées, puis une fois toutes les contributions additionnées, les tendances sont appliquées aux scalaires.

<sup>2</sup>Les hydrométéores sont les particules d'eau liquides ou solides présentes dans l'atmosphère.

<sup>3</sup>L'eau totale représente la quantité totale d'eau présente quelle que soit son état.

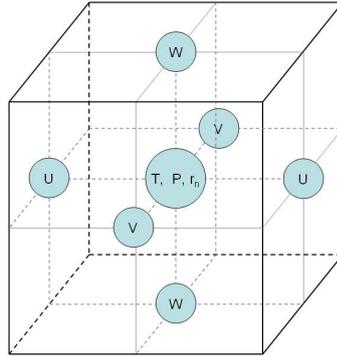


FIG. II.2.1 – Schéma d'une maille de la grille utilisée par le modèle.  $u$ ,  $v$  et  $w$  sont les trois composantes du vent et  $T, P$  et  $r_n$  sont respectivement la température, la pression et le rapport de mélange en hydrométéores.

## II.2.2 Méthode de discrétisation

Nous décrivons ici la configuration de la grille de calcul du modèle. En effet, que ce soit pour la description spatiale du domaine ou pour l'intégration temporelle des équations, la discrétisation est nécessaire. Nous présentons d'abord la méthode de discrétisation spatiale, puis une option fréquemment utilisée du modèle, l'imbrication de grilles. Enfin nous abordons la discrétisation temporelle.

### II.2.2.1 Discrétisation spatiale

Pour décrire le domaine couvert lors de la simulation, il est nécessaire d'utiliser une grille de points de résolution fixée par l'utilisateur. Dans le modèle, la grille utilisée est de type Arakawa-C (Mesinger & Arakawa, 1976). Les variables thermodynamiques sont calculées au centre de chaque maille, tandis que les composantes du vent le sont sur chaque face, comme le décrit la figure II.2.1. Afin de réduire les distorsions géométriques dues à la projection du centre du domaine d'étude, le modèle utilise les coordonnées stéréo-polaires pour la grille horizontale.

Verticalement, le relief est pris en compte par l'utilisation du système de coordonnées  $\sigma_z$  (Gal-Chen & Somerville, 1975; Clark, 1977; Tripoli & Cotton, 1982) dans lequel la composante verticale  $z^*$  est définie par :

$$z^* = H \left( \frac{z - z_g}{H - z_g} \right) \quad (\text{II.2.8})$$

où  $H$  est la hauteur maximale de la grille et  $z_g$  la topographie. La figure II.2.2 montre un exemple de niveaux verticaux utilisant cette coordonnée. Ainsi, les niveaux proches du sol suivent la topographie tandis que les niveaux élevés sont plats. L'utilisation de ces coordonnées offre l'avantage d'éviter le traitement des conditions aux limites nécessaires en cas d'intersection de la topographie par la grille du modèle.

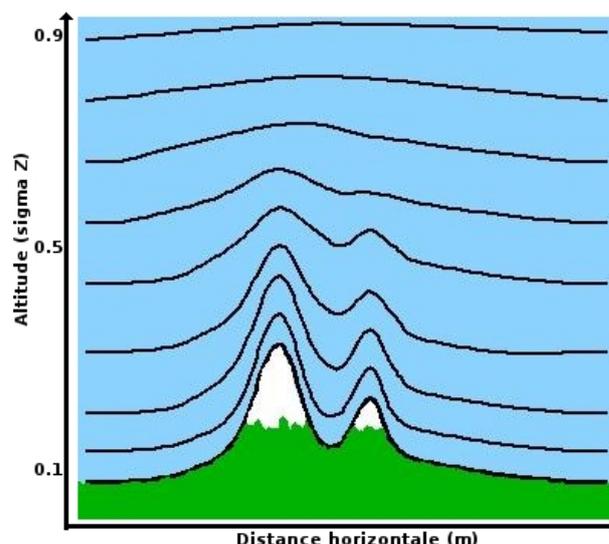


FIG. II.2.2 – Représentation des coordonnées  $\sigma_z$ . La partie verte et blanche correspond à la topographie. Les différents niveaux verticaux sont représentés en noir.

### II.2.2.2 Imbrication de grilles

Une option très intéressante et fréquemment utilisée est la possibilité d'imbriquer une ou plusieurs grille(s) au sein d'une grille mère, chaque grille fille ayant sa propre résolution, plus fine spatialement et temporellement que celle de la grille mère. Ceci permet de détailler les phénomènes se déroulant sur un domaine ciblé tout en ayant une information sur l'extérieur venant du même modèle, assurant ainsi une cohérence des champs simulés. La limite au nombre de grilles est fonction de la mémoire disponible et des contraintes en temps de calcul. Il est possible d'imbriquer les grilles en configuration « zoom » (c'est à dire avec une résolution de plus en plus fine) et/ou des grilles filles de même résolution, mais à des endroits différents.

La communication entre la grille mère et la grille fille suit un schéma bidirectionnel. A l'instant  $t$ , les valeurs de la grille mère sont interpolées sur la grille fille. Au cours du pas de temps de la grille mère et pour chaque pas de temps de la grille fille, les valeurs aux bords de cette dernière sont remplacées par une interpolation en temps des valeurs de la grille mère. Lorsque le nombre de pas de temps sur la grille fille atteint le pas de temps de la grille mère, les valeurs de la grille fille sont réutilisées par la grille mère, assurant ainsi un retour du gain de résolution sur celle-ci.

### II.2.2.3 Discrétisation temporelle

La résolution des équations au cours du temps se fait à l'aide d'un schéma numérique discret. La contrainte majeure sur ce schéma est sa stabilité : l'écart entre la valeur calculée et la valeur réelle ne doit pas augmenter exponentiellement au cours du temps. Pour qu'un schéma numérique soit stable, il est nécessaire d'utiliser un pas de temps  $\Delta t$  adapté à la résolution spatiale utilisée. Ainsi, plus la résolution spatiale est fine, plus le pas de temps doit être court. Dans le modèle utilisé, il existe trois options :

- différences avant
- différences centrales (« leapfrog » en anglais)
- schéma hybride

Les différences avant utilisent la valeur à l'instant  $t$  pour calculer la valeur à l'instant  $t + \Delta t$ . Avec les différences centrales, c'est l'instant  $t - \Delta t$  qui est utilisé pour calculer la valeur à l'instant  $t + \Delta t$ . Quant au schéma hybride, il utilise une combinaison des deux schémas précédents : les différences avant pour les variables thermodynamiques, et les différences centrales pour les composantes du vent et la pression. C'est ce dernier schéma qui est couramment utilisé, en particulier dans les travaux présentés ici.

Pour que le schéma des différences centrales soit stable, la condition de Courant, Friedrichs et Lewy (CFL) doit être vérifiée. Elle stipule que la distance  $U\Delta t$  parcourue par une onde au cours d'un pas de temps ne doit pas être supérieure à  $\Delta x/\sqrt{2}$  (avec  $U$  la vitesse caractéristique,  $\Delta t$  le pas de temps et  $\Delta x$  la résolution spatiale). Ceci revient à dire que l'onde ne peut se déplacer de plus d'une cellule de la grille du modèle au cours d'un pas de temps.

### II.2.3 Paramétrisations

Les différents processus atmosphériques mettent en jeu un spectre très large d'échelles spatiales et temporelles. La représentation explicite des processus d'échelle plus fine que la maille choisie est remplacée par une représentation paramétrisée, c'est-à-dire une représentation simplifiée donnant leurs effets moyens à l'échelle de la maille du modèle. Il existe plusieurs processus représentés à l'aide de paramétrisations détaillées ci-après.

#### II.2.3.1 Paramétrisation microphysique

L'eau est un élément important de l'atmosphère. En particulier, elle a un fort impact sur le bilan radiatif et influence la température de l'air par la libération ou l'absorption de chaleur latente lors de ses changements d'état. A ces changements d'état sont associées la formation, la croissance ou la décroissance des hydrométéores. Ces hydrométéores interagissent entre eux lors de collisions et peuvent ainsi évoluer. Par exemple, des gouttes de nuage liquide peuvent former une goutte de pluie par coalescence. L'ensemble de ces phénomènes (changements d'états, formation, croissance et décroissance des hydrométéores) est représenté par un modèle microphysique. Plusieurs modèles microphysiques sont disponibles dans le BRAMS, permettant à l'utilisateur de moduler le degré de complexité de la simulation effectuée.

Dans cette étude, nous avons utilisé le schéma microphysique décrit dans Walko *et al.* (1995). Ce schéma calcule le rapport de mélange pour chacune des catégories suivantes d'hydrométéores :

- pluie
- petits cristaux de glace
- neige
- agrégats
- grésil
- grêlons
- eau totale

Connaissant le rapport de mélange en eau totale et pour ces différentes catégories d'hydrométéores, les rapports de mélange pour la vapeur d'eau et les particules nuageuses liquides sont calculés par :

$$r_v + r_c = r_t - \sum_n r_n \quad (\text{II.2.9})$$

$r_v$  est le rapport de mélange en vapeur d'eau,  $r_c$  le rapport de mélange en particules nuageuses liquides et  $r_t$  en eau totale.  $n$  correspond aux catégories d'hydrométéores à l'exclusion des particules nuageuses liquides. La partition entre  $r_v$  et  $r_c$  est faite à partir du rapport de mélange à saturation en vapeur d'eau par rapport à l'eau liquide : lorsque le rapport de mélange en vapeur d'eau dépasse la saturation, l'excès est transformé en particules nuageuses liquides.

Pour chacune des variables microphysiques pronostiques, le rapport de mélange est donné par l'expression suivante :

$$\frac{\partial r_n}{\partial t} = \left( \frac{\partial r_n}{\partial t} \right)_{adv} + \left( \frac{\partial r_n}{\partial t} \right)_{turb} + \left( \frac{\partial r_n}{\partial t} \right)_{sedim} + S + P \quad (\text{II.2.10})$$

$r_n$  est le rapport de mélange pour la catégorie  $n$  et les termes  $adv$ ,  $turb$ ,  $sedim$ ,  $S$  et  $P$  correspondent respectivement aux termes d'advection, de diffusion turbulente, de sédimentation, aux sources et aux puits. Les termes source et puits correspondent aux processus suivants :

- nucléation des particules nuageuses ou de glace
- croissance par dépôt de vapeur
- évaporation / sublimation
- congélation / fonte
- éclatement des hydrométéores
- sédimentation
- accréation d'hydrométéores

Dans le schéma que nous avons choisi, la distribution en taille de chacun des types d'hydrométéores est supposé suivre une fonction gamma généralisée (Flatau *et al.*, 1989; Verlinde *et al.*, 1990) :

$$f_{gam}(D) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \left( \frac{D}{D_n} \right)^{\nu-1} \frac{1}{D_n} e^{-\frac{D}{D_n}} \quad (\text{II.2.11})$$

où  $\Gamma(\nu)$  est la constante de normalisation,  $D$  est le diamètre de l'hydrométéore ( $m$ ),  $D_n$  le diamètre caractéristique de la fonction gamma modifiée ( $m$ ) et  $\nu$  est le paramètre de forme de la fonction gamma (sans dimension). Connaissant le nombre total  $N_t$  ( $m^{-3}$ ) de particules pour une catégorie, on remonte à la distribution dimensionnelle des particules  $n(D)$  de la façon suivante :

$$n(D) = N_t f_{gam}(D) \quad (\text{II.2.12})$$

Le rapport de mélange massique ( $g_{eau}/kg_{air}$ ) pour cette catégorie est alors donné par :

$$r_n = \int \frac{m(D)}{\rho_a} n(D) dD = \frac{N_t}{\rho_a} \alpha_m D_n^{\beta_m} \frac{\Gamma(\nu + \beta_m)}{\Gamma(\nu)} \quad (\text{II.2.13})$$

Dans cette expression, la masse en fonction du diamètre est donnée par  $m(D) = \alpha_m D^{\beta_m}$ , où  $\alpha_m$  et  $\beta_m$  sont deux paramètres dépendants du type d'hydrométéore considéré, avec  $\alpha_m$  en  $kg m^{-\beta_m}$ .  $\rho_a$  est la densité de l'air sec ( $kg m^{-3}$ ).

Un schéma à un moment et un schéma à deux moments sont disponibles dans le BRAMS. Un schéma à un moment utilise le rapport de mélange de l'eau et des hydrométéores ( $kg_{eau}/kg_{air}$ ) comme variable pronostique pour chaque catégorie d'eau. Un schéma à deux moments utilise en

plus la concentration ( $m^{-3}$ ). Le schéma décrit dans Walko *et al.* (1995) et que nous avons choisi est un schéma à un moment. Dans ce cas, une seule équation est résolue pour chaque type d'hydrométéores, ce qui implique de fixer deux paramètres de la fonction gamma. Ici, ce sont les paramètres  $\nu$  et  $D_n$  qui sont fixés. Les petits cristaux de glace constituent la catégorie d'entrée pour les hydrométéores glacés et sont décrits de manière plus détaillée en utilisant également l'équation pour la concentration pour cette catégorie.

Le schéma microphysique que nous avons choisi permet une description détaillée des échanges d'eau sous ses différentes formes dans l'atmosphère et d'énergie associée (chaleur latente), représentant ainsi les interactions entre la microphysique et la thermodynamique. Les échanges de chaleur latente sont pris en compte dans l'évolution de la température potentielle.

### II.2.3.2 Paramétrisation radiative

L'interaction des flux solaire et terrestre avec notre atmosphère et ses constituants a un impact majeur sur la température au sol et sur celle des masses d'air. Le degré de complexité requis pour décrire cette interaction varie fortement en fonction de l'étude menée. Quatre schémas permettant d'effectuer le bilan radiatif sont proposés dans le BRAMS : Mahrer & Pielke (1977), Chen & Cotton (1983), Harrington (1997) et CARMA (Toon *et al.*, 1988, 1989).

Le premier schéma (Mahrer & Pielke, 1977) est le plus simple, et ne tient pas compte de l'eau sous forme liquide ou solide. Il prend simplement en compte la diffusion et l'absorption de la lumière aux courtes longueurs d'onde par les principaux gaz tels l'oxygène, l'ozone et le dioxyde de carbone, ainsi que l'absorption par la vapeur d'eau. L'émission et l'absorption de lumière aux grandes longueurs d'onde par la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone sont également prises en compte.

Le deuxième, Chen & Cotton (1983), est plus sophistiqué et prend en plus en compte le forçage radiatif induit par les nuages pour les grandes et courtes longueurs d'onde, mais sans différencier les catégories d'hydrométéores. Ce schéma utilise une solution complète de l'équation de transfert radiatif.

Le troisième, Harrington (1997), détaille d'avantage le bilan radiatif. Il a été conçu pour un traitement détaillé des différentes catégories d'hydrométéores et résout l'équation de transfert radiatif par une méthode à deux flux.

Enfin, le dernier, CARMA (Toon *et al.*, 1988, 1989), prend en compte l'effet des aérosols sur le bilan radiatif en plus de l'effet des différents hydrométéores.

### II.2.3.3 Paramétrisation du sol

Les paramétrisations du sol et des types de couverts végétaux permettent le calcul de la température et de l'humidité spécifique près de la surface. Ces dernières sont ensuite utilisées par la paramétrisation de la couche de surface (Louis, 1979) pour obtenir la valeur des flux de chaleur, de quantité de mouvement et de vapeur d'eau, particulièrement importants pour la convection.

Il existe trois types de surface dans le BRAMS : l'eau, le sol nu et le sol couvert de végétation. Ces trois classes sont différenciées dans la paramétrisation de la couche de surface. Pour l'eau, la température est considérée constante sur quelques jours, mais varie spatialement et les valeurs d'humidité sont les rapports de mélange saturants définis par la pression de surface et la température de l'eau.

Il existe douze catégories de sols nus permettant une description détaillée des différentes surfaces. Pour celles-ci, les valeurs de température et d'humidité sont obtenues à partir des valeurs pronostiques de la température et de l'humidité données par un modèle de sol multicouche inclus dans le BRAMS et décrit par Tremback & Kessler (1985). Ce modèle est une version modifiée des schémas décrits par Mahrer & Pielke (1977) et McCumber & Pielke (1981). Les nombreux processus itératifs ont été remplacés par une formulation des équations pronostiques pour la température de surface du sol et le contenu en eau en supposant une couche finie d'interface entre le sol sous la surface et l'atmosphère. Entre sept et douze couches sont définies jusqu'à une profondeur fixée par l'utilisateur et située entre 0.8 et 1.2 mètres pour une simulation typique.

Le couvert végétal est traité par le modèle LEAF-3 (Land Ecosystem-Atmosphere Feedback). Ce modèle permet la prise en compte de l'interaction entre l'atmosphère et les différentes canopées par une analogie avec les résistances électriques à partir des données élémentaires sur la végétation (LAI : « Leaf Area Index », pourcentage d'occupation, albédo et rugosité). Le BRAMS utilise entre 18 et 30 catégories de végétation ou assimilées (par exemple l'eau liquide, les glaciers ou encore les villes). La procédure utilisée permet la prise en compte de l'hétérogénéité sous-maille du type de sol et de végétation par l'utilisation de « patches ». Un patch représente une fraction d'une cellule et permet de prendre en compte les hétérogénéités sous-maille et de conserver ainsi une partie plus importante de la résolution de départ (1 km) des données d'entrée.

#### II.2.3.4 Paramétrisation de la turbulence

Les résolutions horizontales et verticales définies par l'utilisateur déterminent les échelles spatiales qui peuvent être explicitement résolues. Les paramétrisations de la turbulence permettent la prise en compte des flux de moment et de scalaires non résolus, c'est à dire à l'échelle sous-maille. Le transport turbulent est exprimé en terme de covariance de la forme  $\overline{u'_i u'_j}$  pour la quantité de mouvement et  $\overline{u'_i \phi'}$  pour les scalaires, où  $i$  et  $j$  correspondent aux directions de l'espace,  $u_i$  est la composante du vent effectuant le transport,  $u_j$  est la composante du vent transportée,  $\phi$  représente un scalaire transporté, la barre horizontale représente la moyenne de Reynolds (sur le volume d'une cellule de la grille) et le prime représente l'écart à cette moyenne. La contribution de la turbulence non résolue s'ajoutant à l'advection résolue est donnée par la convergence des flux turbulents :

$$\left( \frac{\partial u_j}{\partial t} \right)_{TURB} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial (\overline{u'_i u'_j})}{\partial x_i} \quad (\text{II.2.14})$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_{TURB} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial (\overline{u'_i \phi'})}{\partial x_i} \quad (\text{II.2.15})$$

La paramétrisation de la turbulence choisie dans le modèle est un schéma de déformation-K. Les covariances y sont calculées comme le produit d'un coefficient de diffusion turbulente par le

gradient de la quantité transportée. Pour les scalaires, ceci prend la forme suivante :

$$\overline{u'_i \phi'} = -K_{hi} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.2.16})$$

Où  $K_{hi}$  est le coefficient de diffusion turbulente pour les scalaires dans la direction  $i$ . Pour les composantes du vent lorsque les résolutions horizontale et verticale sont comparables, l'expression utilisée est la suivante :

$$\overline{u'_i u'_j} = -K_{mi} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.2.17})$$

où  $K_{mi}$  est le coefficient de diffusion turbulente pour la quantité de mouvement dans la direction  $i$ . On suppose ici que  $K_{mi} = K_{mj}$  et donc que  $\overline{u'_i u'_j} = \overline{u'_j u'_i}$ .

Si la résolution horizontale est plus grossière que la résolution verticale, l'expression II.2.17 est utilisée uniquement pour la composante horizontale de la diffusion et lorsque  $i$  et/ou  $j$  font référence à la composante verticale elle est remplacée par :

$$\overline{u'_i u'_j} = -K_{mi} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (\text{II.2.18})$$

La valeur du coefficient de diffusion turbulente dans les expressions précédentes peut être calculée à partir de quatre schémas. Deux de ces schémas utilisent l'approche de Smagorinsky (1963) en incluant les corrections pour l'influence de la fréquence de Brunt-Vaisala (Hill, 1974) et pour le nombre de Richardson (Lilly, 1962). Ils sont purement locaux dans la mesure où le calcul du coefficient de diffusion turbulente n'utilise que l'état local de l'atmosphère au moment où le coefficient est calculé. Les deux autres schémas (Deardorff, 1980; Mellor & Yamada, 1974, 1982) calculent le coefficient de diffusion turbulente à l'aide d'une paramétrisation de l'énergie cinétique turbulente (notée TKE : Turbulent Kinetic Energy) sous-maille. Ces deux schémas sont non locaux car la TKE peut être transportée d'un endroit à l'autre du domaine. La TKE est définie par :

$$TKE = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (\text{II.2.19})$$

### II.2.3.5 Paramétrisation de la convection

Dans le modèle, la convection peut être calculée explicitement si la résolution horizontale utilisée est de quelques kilomètres au plus. Si la résolution n'est pas suffisamment fine, la convection calculée explicitement sera peu intense, ne pouvant représenter que les cellules convectives de taille supérieure à la résolution de la grille. Il est donc nécessaire de prendre en compte les phénomènes convectifs sous-maille. Cependant, cette prise en compte est complexe du fait des différences d'échelles utilisées. En effet, la paramétrisation à utiliser ne sera pas la même si l'on étudie un système méso-échelle (de 100 à 1000 km) ou un système méso- $\beta$ -échelle (de 50 à 200 km) car l'interaction avec l'environnement n'est pas la même. En règle générale, une paramétrisation est définie pour une gamme d'échelle particulière et doit être adaptée en cas d'étude en dehors de cette gamme, la contrainte majeure à respecter dans l'utilisation d'une paramétrisation étant une séparation nette d'échelle entre la résolution des phénomènes permise par la résolution de la grille et l'échelle des phénomènes paramétrisés. Dans le modèle, trois schémas peuvent être utilisés : celui de Kuo (1974) modifié par Tremback (1990) et ceux de Grell (1993) complétés pour les fermetures par Grell & Dévényi (2002) (convection profonde) et celui de Grell *et al.* (1994) (convection restreinte).

Pour chacune de ces paramétrisations l'hypothèse suivante est faite : l'ensemble du phénomène convectif se déroule sur une seule colonne de la grille. La paramétrisation de la convection ne doit donc être utilisée que pour des résolutions suffisamment grossières, typiquement au-dessus de 10 à 20 km, et en-dessous d'une centaine de kilomètres.

Le schéma de Kuo (1974) modifié est un schéma de type « ajustement » qui permet la représentation de la convection restreinte et de la convection profonde. Il utilise la différence de température entre le nuage et l'environnement et la convergence d'humidité pour déterminer la redistribution verticale de chaleur (latente et sensible). L'implémentation actuelle dans le modèle de ce schéma n'inclut pas le transport de traceurs. Nous ne pouvons donc l'employer pour les travaux menés.

Le schéma de Grell (1993) est utilisé pour la convection profonde. Dans ce schéma simple de flux de masse, l'approche choisie est de type « plume » dans laquelle le spectre de nuages a été réduit à un nuage. Ce dernier est composé de deux circulations stables créées par un flux ascendant et un flux descendant (Grell *et al.*, 1994). Le mélange avec l'air environnant ne se fait qu'à la base et au sommet de chacune de ces circulations. Il n'y a pas d'entraînement ni de déentraînement le long de la colonne convective (Grell *et al.*, 1994). En dehors de l'approche par flux de masse, le principal avantage de la paramétrisation de Grell (1993) pour la convection profonde est sa simplicité, offrant la possibilité d'utiliser plusieurs fermetures :

- Grell (Grell, 1993; Grell *et al.*, 1994)
- « Low level Omega » (Frank & Cohen, 1987)
- Convergence d'humidité (Kuo, 1974; Krishnamurti *et al.*, 1983)
- Type « Fritsch-Chappel » ou « Kain-Fritsch » (Kain & Fritsch, 1990)
- « Arakawa-Schubert » (Arakawa & Schubert, 1974)
- Ensemble (Grell & Dévényi, 2002)

Ces différentes fermetures permettent de déterminer le flux de masse à la base du nuage à partir des forçages de grande échelle. La fermeture nommée Ensemble utilise l'ensemble des autres fermetures pour prévoir le flux de masse optimal à la base du nuage (Grell & Dévényi, 2002; Freitas *et al.*, 2007) événement par événement en se basant sur une approche statistique s'appuyant sur les travaux de Stephenson & Doblus-Reyes (2000).

Le schéma de Grell *et al.* (1994) pour la convection restreinte est un mélange du schéma basé sur celui de Arakawa & Schubert (1974) et du schéma pour la convection profonde de Grell (1993) (Grell *et al.*, 1994). Les propriétés sont très différentes : le mélange latéral est fort et il n'y a pas de flux convectif descendant. Pour cette paramétrisation, plusieurs fermetures sont disponibles dans le code du CATT-BRAMS. Celle utilisée est la fermeture du type « Fritsch-Chappel » ou « Kain-Fritsch ».

## II.2.4 Conditions initiales et aux limites

Que le cas étudié soit idéalisé ou non, il est nécessaire de fournir au modèle un état initial de l'atmosphère au début de la simulation. Il faut également donner des conditions aux limites au sol, latérales et au sommet de la grille de calcul. Afin d'améliorer le réalisme de la simulation lors de l'étude de cas réels, on applique un forçage au modèle au cours de la simulation. Ce forçage est utilisé en plus des conditions aux limites.

#### II.2.4.1 Initialisation dans le cas de simulations de cas réels

Les données météorologiques (composantes horizontales du vent, pression, température et humidité) introduites dans le modèle proviennent d'analyses. Ces dernières sont constituées de champs d'un modèle global comme celui du Centre Européen pour les Prévisions Météorologiques à Moyen Terme (CEPMMT) de Reading en Angleterre ou du Centre de Prévisions Météorologiques et d'Études Climatiques au Brésil (CPTEC : Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos) auxquelles peuvent être incorporées des données issues de radiosondages et de stations de surface à l'aide d'un schéma 4DDA (Four Dimension Data Assimilation). Ces analyses constituent la meilleure estimation de l'état de l'atmosphère à un instant donné.

#### II.2.4.2 Initialisation de la surface

L'humidité dans les niveaux de sol est initialisée à partir de données issues d'un modèle hydrologique simple. Sont fournies à ce modèle les estimations des précipitations faites par les instruments embarqués à bord du satellite TRMM, ainsi que le type de végétation présente et la texture des sols (Gevaerd & Freitas, 2006). Les données sur le type de végétation présente sont fournies par l'USGS grâce aux données à 1 km de résolution de l'instrument satellite AVHRR (Advanced Very High Resolution Radiometer). Pour le bassin Amazonien, les données ont été mises à jour par le projet PROVEG (<http://www.cptec.inpe.br/proveg/index.shtml>) de l'INPE et du CPTEC à partir des images de l'instrument TM à bord du satellite Landsat. Les données de texture des sols proviennent de l'organisation FAO (Food and Agriculture Organization of the United Nations, <http://www.fao.org/>). A partir de ces données sont obtenues des champs journaliers sur l'humidité des sols sur huit niveaux et reproduisant de façon satisfaisante les structures observées et leur variabilité temporelle. L'initialisation obtenue est donc hétérogène et la plus réaliste possible.

La température de la surface océanique (SST : Sea Surface Temperature) est également initialisée à partir d'analyses provenant de la NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration). Ces analyses sont faites à partir de mesures in situ (à partir de bateaux, Kent *et al.*, 1993, 1999, ou de bouées, McPhaden & Coauthors, 1998) et de mesures satellites (entre autres l'instrument AVHRR, mais également par d'autres instruments satellite). Elles ont une résolution temporelle hebdomadaire et une résolution spatiale de 1°. La méthode utilisée est la méthode d'interpolation optimale (Gandin, 1963) tant pour la première version de ces analyses (Reynolds & Smith, 1994) que pour la deuxième version (Reynolds *et al.*, 2002) qui utilise en plus un nouvel algorithme de correction des biais des mesures satellites et de conversion de la concentration en glace en SST.

En plus des données de couvert végétal, le NDVI (Normalize Difference Vegetation Index) est utilisé par le modèle LEAF 3 pour calculer l'indice de surface foliaire (LAI), l'albédo de la végétation et la rugosité de la surface. Cet indice est obtenu par mesure des différence entre l'intensité lumineuse reçue et réfléchi vers l'espace dans le visible et dans le proche infra-rouge. Plus cet indice est élevé, plus la végétation est dense.

#### II.2.4.3 Limites latérales

Le modèle dispose de plusieurs possibilités pour les conditions aux limites appliquées aux composantes horizontales du vent normales aux bords du domaine afin d'éviter les réflexions vers l'intérieur du domaine. Lorsque l'initialisation choisie est horizontalement homogène, il est possible

d'utiliser des conditions périodiques ou cycliques.

Dans les autres cas, c'est le schéma de Klemp & Wilhelmson (1978a,b) qui est utilisé pour la composante du vent normale au bord du domaine. Il s'agit d'une condition dite radiative (Sommerfeld, 1964) qui prend la forme suivante pour les bords est et ouest :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -(u + c) \frac{\partial u}{\partial x} \quad (\text{II.2.20})$$

où  $u$  est la composante du vent normale au bord de la grille et  $c$  la vitesse de phase des ondes de gravité. La même relation est utilisée avec l'autre composante horizontale du vent pour les bords nord et sud. Le calcul de  $c$  peut s'effectuer de plusieurs manières. La première manière consiste à simplement préciser la vitesse de phase en entrée du modèle. Le schéma d'Orlanski calcule la valeur de  $c$  pour chaque niveau de la grille du modèle. Il est aussi possible de moyenner la vitesse de phase d'Orlanski puis d'appliquer cette moyenne à la colonne entière (schéma de Klemp & Lilly 1978). Si l'on spécifie  $c$ , la valeur conseillée est  $20 \text{ ms}^{-1}$ , ce qui permet de laisser les ondes de gravité sortir du domaine. C'est cette valeur que nous avons utilisée.

Pour les grandeurs autres que la composante normale du vent, il existe quatre conditions aux limites possibles :

- gradient nul pour les flux entrants et sortants
- gradient nul pour les flux entrants, condition « radiative » pour les flux sortants
- valeur constante dans le temps pour les flux entrants, condition radiative pour les « flux » sortants
- valeur constante dans le temps pour les flux entrants et sortants

L'option la plus utilisée est la condition de gradient nul pour les flux entrants et sortants. C'est cette option que nous avons utilisée.

#### II.2.4.4 Limites au sommet

Les conditions au sommet de la grille de calcul ont pour rôle d'amortir les ondes de gravité afin d'éviter une réflexion de ces ondes vers l'intérieur du domaine. Le modèle offre plusieurs possibilités selon la configuration initiale et le type de simulation. Pour les initialisations horizontalement homogènes, deux conditions aux limites peuvent être utilisées : la condition de mur ( $w = 0$ ) ou la condition radiative appliquée aux ondes de gravité (Klemp & Durran, 1983). En conjonction avec l'une ou l'autre de ces conditions aux limites, une couche absorbante peut être utilisée entre le haut du domaine d'intérêt et le sommet de la grille pour les trois composantes du vent et la température potentielle. Les caractéristiques principales de cette couche, fournies par l'utilisateur, sont le nombre de points sur lesquels s'étend cette couche et le temps caractéristique de décroissance exponentielle appliqué au sommet de la couche. Ce temps diminue vers le bas du domaine, devenant nul pour le premier point constituant cette couche.

Dans le cas d'une initialisation horizontalement inhomogène, le schéma utilisé est semblable à celui de Davies (1976) ou à la couche de friction de Rayleigh, comme précédemment, forçant le modèle à tendre vers l'état inhomogène de référence. Dans ce cas, les caractéristiques principales de la couche d'amortissement sont l'altitude à laquelle elle commence et les valeurs du forçage en

haut du domaine. Lors d'une simulation, si l'on utilise une couche d'amortissement, il est essentiel que cette dernière soit située bien au-dessus des phénomènes étudiés afin de ne pas directement les affecter.

Pour les grandeurs autres que les composantes du vent, du fait de la structure de la grille les variables sont définies  $\frac{1}{2}\Delta z$  au-dessus du sommet de la grille sur laquelle sont calculées les composantes du vent. Les valeurs des variables sont alors simplement extrapolées.

#### II.2.4.5 Forçage météorologique dans le cadre de simulations de cas réels

Dans le cadre de simulations de cas réels, il est possible d'appliquer une contrainte principalement aux bords et au sommet du domaine en plus des conditions aux limites correspondantes. Ce forçage utilise des analyses similaires à celle utilisées pour l'initialisation pour forcer le modèle aux limites au cours de la simulation. Pour cela, un terme de rappel est introduit dans les équations avec un poids  $\tau$  défini par l'utilisateur. Celui-ci spécifie le temps de relaxation pour trois régions : les bords, le centre et le haut du domaine. Plus le temps de relaxation est faible, plus le forçage est fort. Ce terme de rappel est défini par :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{(\phi_{obs} - \phi_m)}{\tau} \quad (\text{II.2.21})$$

Où  $\phi$  est une variable pronostique du modèle et  $\phi_{obs}$  et  $\phi_m$  représentent respectivement les valeurs des analyses et les valeurs prédites par le modèle. Ce forçage est en général nul ou très faible au centre du domaine afin de permettre à la physique du modèle d'évoluer par elle-même.

### II.3 Le CATT-BRAMS

Le CATT (Coupled Aerosol and Tracer Transport) est le module couplé en ligne avec le modèle météorologique BRAMS permettant le transport des traceurs et des aérosols (Freitas *et al.*, 2007; Longo *et al.*, 2007). L'équation utilisée est l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{adv} + \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{PBL\ turb} + \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{deep\ conv} + \left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{shallow\ conv} + R + Q \quad (\text{II.3.1})$$

où  $s$  est le rapport de mélange du traceur considéré, *adv*, *PBL turb*, *deep conv* et *shallow conv* signifient respectivement advection, turbulence dans la couche limite planétaire, transport par la convection profonde et restreinte.  $R$  est un terme puits lié au dépôt sec et au temps de vie chimique des traceurs et  $Q$  un terme source associé aux émissions. Les termes de diffusion, de turbulence et convection profonde et restreinte s'appuient sur les formulations du BRAMS pour les grandeurs scalaires.

Les deux catégories de traceurs utilisées dans la version opérationnelle du CATT-BRAMS sont PM2.5 (aérosols de diamètre effectif maximum de 2,5 micromètres) et CO (monoxyde de carbone). La motivation pour l'introduction dans le CATT-BRAMS de cette catégorie d'aérosols est la suivante. Ce modèle est développé au Brésil dans un but de surveillance de pics de pollution liés majoritairement aux feux de biomasse durant la saison sèche. Au cours de ces feux de biomasse, ce n'est pas tant la quantité de CO rejetée qui est importante pour la santé des personnes que la

quantité d'aérosols PM2.5, ces particules pénétrant profondément dans les poumons.

Le monoxyde de carbone est un traceur dynamique, n'ayant pas d'impact sur la météorologie. Ce gaz est émis directement par les feux de biomasse et les activités humaines. Son puits majeur, sa réaction avec OH, est pris en compte via une durée de vie constante de 30 jours (Seinfeld & Pandis, 1998). Les aérosols sont des traceurs dynamiques, mais contrairement au monoxyde de carbone, ils ont un impact sur les champs météorologiques via leur influence sur le bilan radiatif. Cet effet n'est pris en compte que dans la paramétrisation CARMA (Toon *et al.*, 1988, 1989). Pour cette catégorie de traceur, un terme de lessivage  $W_{PM2.5}$  basé sur les travaux de Berge (1993) est ajouté à l'équation II.3.1 (Freitas *et al.*, 2005). La seule source d'aérosols dans le modèle est l'émission par les feux de biomasse, et les seuls puits sont les dépôts sec et humide. Comme l'état initial de la concentration d'aérosols dans l'atmosphère est pris nul, seul ce qui est émis au cours de la simulation peut avoir un impact sur le bilan radiatif.

### II.3.1 Émissions

Que ce soit pour le transport de traceurs ou la partie chimique du modèle, les termes sources des espèces utilisées doivent être introduits. Pour que les sources introduites soient réalistes, les cadastres d'émission anthropiques à l'échelle globale autres que les feux de biomasse fournis par la base de données EDGAR (Ensemble Database for Global Atmospheric Research, disponible sur Internet : <http://www.mnp.nl/edgar/>) sont utilisés. Dans la mesure où cette description est une description générale d'un modèle développé en premier lieu pour les études en saison sèche et ne comportant pas de schéma chimique, les émissions des autres composés ne sont pas abordées ici. En particulier, l'isoprène, composé important émis par les forêts, n'est pas abordé ici.

Pour les émissions liées aux feux de biomasse, un modèle d'émission a été développé au CPTEC. Ce modèle utilise les données de localisation et de surface des feux de biomasse de l'instrument MODIS à bord des satellites TERRA et AQUA de la NASA (<http://modis.gsfc.nasa.gov/>), des données de couverture végétale, de densité de carbone et les facteurs d'émission par catégorie de végétaux. Pour un traceur  $\eta$  et pour chaque feu détecté, la quantité de biomasse disponible pour la combustion  $\alpha$ , le facteur de combustion  $\beta$ , le facteur d'émission  $EF$  et la surface du feu  $a_{fire}$  permettent de déterminer la masse de traceur émis :

$$M^{[\eta]} = \alpha_{veg} \cdot \beta_{veg} \cdot EF_{veg}^{[\eta]} \cdot a_{fire} \quad (\text{II.3.2})$$

Ainsi, les données brutes, fournies à une échelle très fine, peuvent être adaptées directement à la résolution du modèle : il suffit de faire la somme des feux par cellule de la grille. La figure II.3.1 résume cette démarche. Afin d'accroître le réalisme de ces émissions dans le modèle, un modèle 1D a été imbriqué, permettant la répartition verticale des émissions lors de montées convectives dues à l'apport d'énergie par les feux. C'est l'effet « plume rise » : accroissement de la flottabilité des masses d'air dû à l'apport de chaleur par le feu (Freitas *et al.*, 2005).

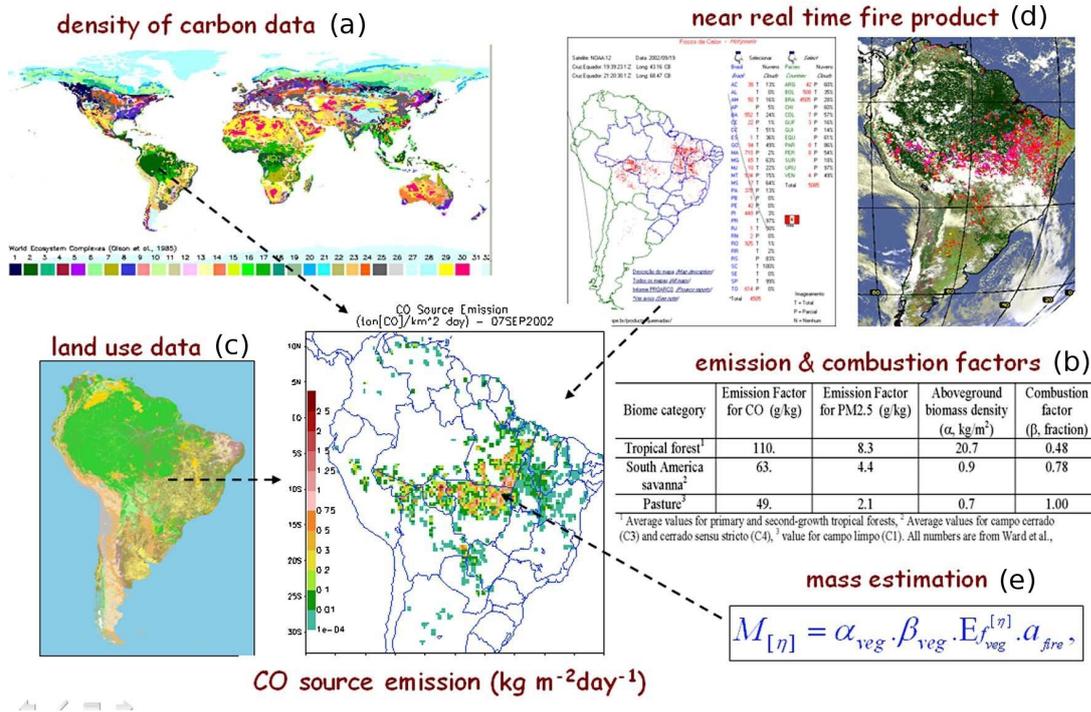


FIG. II.3.1 – Données utilisées pour calculer les émissions de CO dues aux feux de biomasse (Longo et al., 2007). La valeur de  $\alpha$  est fournie par les données de densité de carbone (a), les paramètres  $\beta$  et EF (b) sont connus pour plusieurs types de végétation notés veg. Ceux-ci sont obtenus grâce aux données d'occupation des sols (c). Quant à la surface du feu, elle est donnée par les produits MODIS (d). Connaissant tous ces paramètres, la masse de traceur  $\eta$  émis peut être calculée (e).

### II.3.1.1 Variabilité temporelle des sources

Les données fournies par les bases de données ont au mieux une résolution mensuelle. Néanmoins, il existe une variabilité au cours du mois et au cours de la journée. Cette variabilité est donc ajoutée par l'intermédiaire de cycles modulant l'intensité des émissions. Pour les émissions anthropiques, deux cycles sont utilisés : un cycle hebdomadaire donnant jour par jour l'intensité des émissions relativement à la valeur moyenne sur la semaine, et un cycle journalier rendant compte de la variation de l'activité humaine au cours de la journée en Amérique du Sud. Ces cycles sont montrés sur la figures II.3.2. Pour les émissions des feux de biomasse, les feux étant donnés jour par jour, seule une variation diurne est utilisée pour rendre compte du changement d'activité du feu au cours de la journée, comme montré dans l'étude de Prins *et al.* (1998). Ce cycle est montré sur la figure II.3.3.

## II.4 Le C-CATT-BRAMS

Le C-CATT-BRAMS (Chemistry-CATT-BRAMS) est un modèle météorologique et chimique développé au CPTEC en collaboration avec le LPCE. Le modèle dynamique CATT-BRAMS est couplé « en ligne » avec un schéma chimique. Un préprocesseur est utilisé pour incorporer le schéma choisi dans le modèle. Avec ce modèle, nous sommes en mesure d'étudier l'impact de la convection profonde tropicale sur la composition chimique de la troposphère et de la basse stratosphère. Mes contributions à ce modèle concernent le choix des cadastres d'émission et le code de calcul Fast J

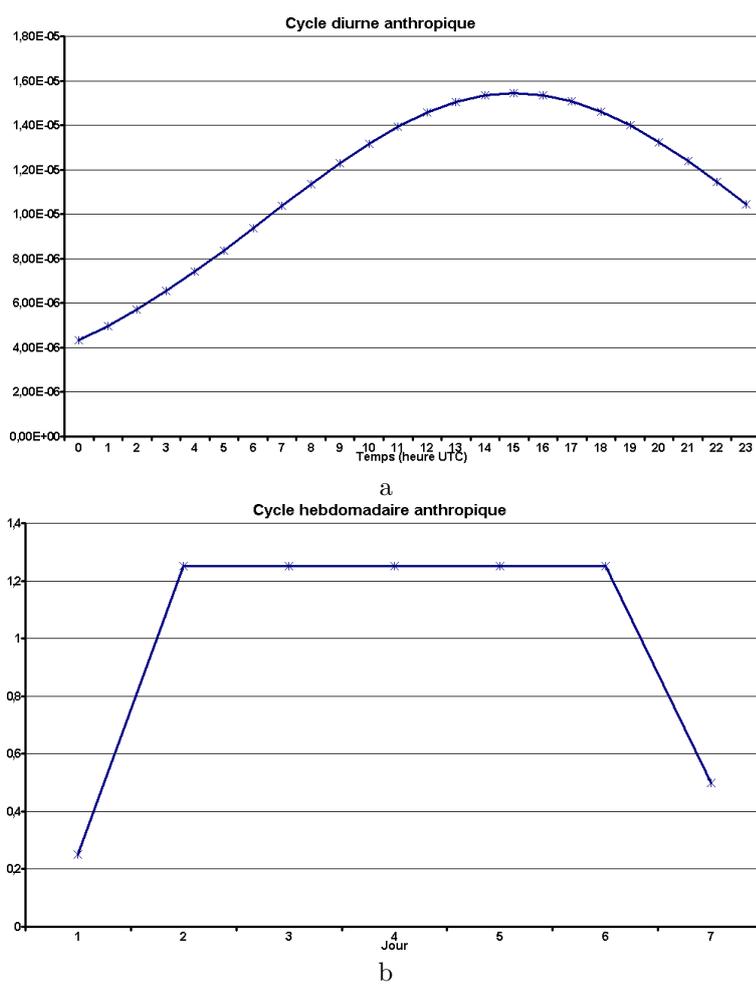


FIG. II.3.2 – Cycles anthropiques utilisés dans le modèle. En (a), l'heure TU est en abscisse. Le cycle journalier (a) module le cycle hebdomadaire (b) pour donner le cycle total.

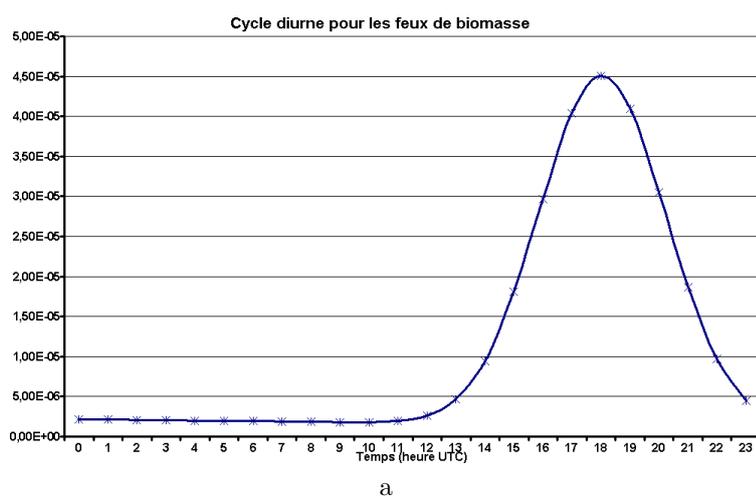


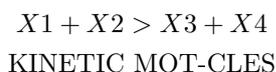
FIG. II.3.3 – Cycle journalier utilisé dans le modèle pour les émissions liées aux feux de biomasses. L'heure TU est en abscisse sur le même domaine que pour la figure précédente.

que j'ai validé et mis à jour.

Dans cette partie, je décris les différents constituants de ce modèle : le préprocesseur SPACK, le mécanisme chimique couplé au modèle, le solveur utilisé pour résoudre le système d'équations pour les concentrations des espèces chimiques, le calcul des taux de photolyse, les paramétrisations spécifiques à la chimie et les conditions initiales et aux limites. Les émissions utilisées dans ce modèle sont présentées dans la partie suivante qui aborde plus en détails mes contributions à ce modèle.

### II.4.1 Préprocesseur : SPACK

Pour préparer la partie chimique du C-CATT-BRAMS, nous utilisons le préprocesseur SPACK (Simplified Preprocessor for Atmospheric Chemical Kinetics, Djouad *et al.*, 2002). Ce code, utilisé par Arteta *et al.* (2006), permet de préparer les programmes en Fortran 90 utilisés par le modèle chimique à partir des espèces chimiques, de leurs propriétés et du mécanisme réactionnel choisis. Le principal avantage de ce système est de permettre de changer rapidement et facilement de mécanisme chimique. Ce préprocesseur a été élaboré à partir des travaux de Faure & Papegay (1998). Plusieurs mécanismes chimiques sont disponibles, dont le mécanisme RACM (Stockwell *et al.*, 1997) que nous avons utilisé. Le mécanisme est précisé de la manière suivante. Une réaction est introduite sous la forme :



Les mot-clés indiquent au préprocesseur le type de réaction et les valeurs requises pour calculer la vitesse de réaction associée. Il est possible d'étendre ce jeu de mot-clés en modifiant le code de SPACK.

### II.4.2 Le mécanisme chimique RACM

Le mécanisme chimique utilisé est RACM (Regional Atmospheric Chemistry Mechanism) (Stockwell *et al.*, 1997). Ce mécanisme est une version révisée du mécanisme RADM2 (second generation Regional Acid Deposition Model, (Stockwell *et al.*, 1990)) dont les constantes de réactions ont été mises à jour et dans lequel plusieurs réactions ont été ajoutées de manière à pouvoir décrire la chimie de la haute troposphère (entre autres les réactions entre  $O(^3P)$  et  $NO_2$  et  $O_3$ , Warneck, 1988). Sont incluses dans ce mécanisme 17 espèces inorganiques stables, 4 intermédiaires inorganiques, 32 espèces organiques stables (dont 4 d'origine principalement naturelle) et 24 intermédiaires organiques, soit un total de 77 espèces interagissant à travers 237 réactions dont la majorité sont des réactions faisant intervenir les composés organiques (Stockwell *et al.*, 1997, table 2a et 2b). La stabilité fait référence à la durée de vie des espèces : les intermédiaires ont des durées de vie très courtes, contrairement aux espèces stables. Ce schéma décrit de manière réaliste la capacité oxydante de l'atmosphère, contrôlée le jour par le radical  $OH$  et par la photolyse de l'ozone (source de radical  $OH$ , Warneck, 1988) et la nuit par l'ozone et le radical  $NO_3$  provenant principalement de la réaction entre  $NO_2$  et  $O_3$  (Morris & Niki, 1974; Japar & Niki, 1975; Platt *et al.*, 1980). Ce schéma permet un bilan correct de l'ozone aussi bien dans la basse troposphère que dans la haute troposphère.

A ces espèces et réactions inorganiques viennent s'ajouter un grand nombre d'espèces et de réactions organiques. Cependant, contrairement aux espèces inorganiques, beaucoup des composés organiques inclus dans RACM sont en réalité des regroupements d'espèces. Il existe en effet un très grand nombre de composés organiques et un nombre encore plus important de réactions. RACM étant développé dans l'optique d'être utilisé dans un modèle de chimie-transport ou dans un modèle couplé météorologie-chimie, il est exclu de prendre individuellement tous ces composés et d'inclure toutes leurs réactions. Cela serait trop coûteux en temps de calcul et en mémoire. Il a donc été nécessaire de regrouper les espèces en familles d'espèces et aussi de regrouper plusieurs chemins réactionnels en un seul. Ce regroupement d'espèces a été fait selon plusieurs critères : l'amplitude des émissions, les similitudes de groupes fonctionnels et la réactivité des composés avec *HO* (Middleton *et al.*, 1990; Stockwell *et al.*, 1990). La méthode utilisée est générale et peut être utilisée pour adapter le mécanisme à divers inventaires (Stockwell *et al.*, 1997).

Ce schéma est donc adapté à l'étude de l'impact chimique de la convection profonde tropicale, tant par sa consommation raisonnable en temps de calcul que par la précision atteinte sur la prévision des champs chimiques. De plus, ce mécanisme réactionnel est utilisé dans beaucoup de modèles, en particulier le modèle MOCAGE (MOdèle de Chimie Atmosphérique de Grande Echelle) de Météo-France et le modèle RAMS-Chimie (Arteta, 2005).

### II.4.3 Solveur

Les espèces et les réactions du mécanisme chimique mènent à un système d'équations qu'il faut résoudre pour connaître la concentration des différentes espèces. Cette résolution du système est faite à l'aide d'un solveur. Les contraintes sur ce solveur sont les mêmes que celles déjà évoquées : précision du calcul et consommation raisonnable en temps de calcul. En effet, le système d'équation doit être résolu en chaque point de la grille de calcul, avec un pas de temps chimique souvent inférieur au pas de temps météorologique. Ce dernier point est en particulier nécessaire à l'aube et à l'aurore où des transitions brutales ont lieu, comme le démarrage et l'arrêt des réactions de photolyse.

Le système d'équations à résoudre est formé de l'ensemble des lois d'évolution de la concentration des espèces. Pour une espèce donnée, l'évolution de la concentration est décrite par une équation différentielle de la forme :

$$\frac{dY_i}{dt} = P_i - D_i Y_i \quad (\text{II.4.1})$$

où  $Y_i$  est la concentration de l'espèce  $i$ , et  $P_i$  et  $D_i$  sont respectivement les termes de production et de destruction pour cette espèce, faisant intervenir les concentrations d'autres espèces. Pour  $N$  espèces interagissant, on obtient donc le système non-linéaire et couplé (où  $i$  varie de 1 à  $N$ ) :

$$\frac{dY_i}{dt} = f(t, Y_1, Y_2, \dots, Y_N) \quad (\text{II.4.2})$$

Le solveur utilisé dans le C-CATT-BRAMS est un solveur s'appuyant sur la méthode implicite de Rosenbrock (1963). Dans ce type de solveur généralement associé à des systèmes raides d'équations différentielles, le système non linéaire est remplacé par un système linéaire algébrique qui est donné dès le départ avec le schéma considéré (cours de l'ENSTA) en utilisant le Jacobien et résolu en une itération et en une ou plusieurs étape(s). La proposition de généralisation de cette

méthode à des schémas à plusieurs étapes par Rosenbrock (1963) a mené à la formulation de Hairer & Wanner (1991), la méthode de Rosenbrock à  $s$  étapes, qui a permis à cette famille de solveurs d'atteindre une bonne précision.

Le calcul de Jacobien et la résolution des  $s$  systèmes linéaires algébriques (un à chaque étape) demande un temps de calcul plus important que pour les méthodes linéaires, mais les méthodes de Rosenbrock restent très avantageuses pour plusieurs raisons. En premier lieu, la résolution du système se fait généralement efficacement avec un nombre d'étapes inférieur au nombre d'itérations nécessaires à une méthode linéaire, ce qui constitue un premier gain de temps important. D'autre part, du fait de la résolution en  $s$  étape, un calcul de l'erreur locale est fait et utilisé pour adapter le pas de temps. Celui-ci est augmenté lorsque l'erreur est suffisamment faible, permettant ainsi un gain de temps important. Il est important de préciser que l'erreur totale calculée prend en compte des tolérances absolue et relative spécifiées par l'utilisateur. Ce dernier point, associé à l'ajustement possible de différents paramètres intervenant dans le calcul, permet de donner à la méthode des propriétés optimales de stabilité et l'ordre de cohérence désirée (ordre du solveur). De plus comme tout solveur utilisant une méthode implicite, les solveurs du type Rosenbrock conservent le nombre de molécules à condition d'utiliser l'expression exacte du Jacobien.

Les méthodes implémentées dans le C-CATT-BRAMS sont les méthodes ROS2 (solveur au deuxième ordre à 2 étapes, Verwer *et al.* 1999) et RODAS3 (solveur au troisième ordre à 4 étapes, Sandu *et al.* 1997). Ces deux méthodes assurent la conservation, mais seule ROS2 conserve la propriété de positivité des solutions (cours de l'ENSTA). La série de tests effectuée par Sandu *et al.* (1997) montre que les méthodes de Rosenbrock permettent un bon compromis entre précision et coût de calcul.

#### II.4.4 Calcul des taux de photolyse

Les réactions de photodissociation jouent un rôle essentiel dans la chimie atmosphérique. Par exemple, lors des pics de pollution à l'ozone dans la troposphère, la réaction finale menant à la formation d'ozone est la photodissociation de  $NO_2$  en  $NO + O$  suivi de la réaction de l'oxygène  $O$  avec le dioxygène  $O_2$  et  $M$ , une molécule inerte, pour former de l'ozone  $O_3$  :



La méthode la plus simple pour prendre en compte les réactions de photolyse est de précalculer les taux de photolyse avant la simulation. Cependant, pour ces réactions, le taux de photodissociation  $J$  dépend du flux incident. Or ce flux peut être fortement modifié par les conditions météorologiques. En particulier, la présence d'une ou plusieurs couches nuageuses a un impact important sur les réactions de photodissociation. Il est donc nécessaire de prendre en compte les conditions météorologiques dans le calcul du taux de photodissociation. Cela demande un couplage « en ligne » entre le code de calcul des taux de photolyse et le modèle météorologique. Arteta (2005) a en effet montré que l'utilisation « online » d'un code de calcul des taux de photolyse (en l'occurrence Fast J) permet de prendre en compte l'hétérogénéité de nombreux paramètres dont dépend le taux de photolyse (par exemple albédo de sol, nuages). Cette prise en compte est indispensable d'une

part parce qu'elles peuvent modifier de plus de 25% les taux de photolyse par rapport à un calcul hors-ligne et d'autre part parce l'impact de la méthode de calcul sur les espèces réactives est très important.

Pour ne pas être pénalisant en temps de calcul, le code utilisé « en ligne » doit être le plus rapide possible, avec la contrainte d'obtenir des résultats toujours précis. Un tel couplage est possible avec le code Fast J (Wild *et al.*, 2000; Brian & Prather, 2002), ou avec le code Fast TUV (Tie *et al.*, 2003), codes suffisamment rapides pour être couplés « en ligne » avec le modèle météorologique et chimique, et donnant des valeurs de J suffisamment précises. Fast J est le premier des deux codes à avoir été disponible. C'est donc sur ce code que j'ai pu travailler lors de ma première année de thèse. Cependant, Fast J s'est montré plus délicat à coupler au C-CATT-BRAMS que Fast TUV. Ce couplage n'est donc pas encore achevé. Le couplage de Fast TUV avec le C-CATT-BRAMS est fini pour le schéma Carbon Bond et en cours de tests.

#### II.4.4.1 Calcul hors-ligne

Compte-tenu du temps de calcul requis par les codes de photolyse pour fournir les valeurs des taux de photolyse, un couplage « en ligne » avec un modèle météorologique et chimique ou de chimie-transport n'était jusque récemment pas possible. La solution alors adoptée était de précalculer une table de valeurs pour ces taux de photolyse que le modèle consulte pour prendre en compte la photolyse dans les réactions introduites dans le schéma chimique. Cette méthode présente l'avantage d'être rapide, mais ne permet pas la prise en compte dans le taux de photolyse des variations induites par les nuages ou par les aérosols. La table est en général calculée pour des conditions dites de ciel clair, donnant ainsi une valeur de J fonction uniquement de l'angle zénital, de la concentration en oxygène et de la concentration en ozone. Dans le C-CATT-BRAMS, les valeurs de J tabulées ont été calculées à partir du code TUV (Tropospheric UV Visible, Madronich, 1992).

#### II.4.4.2 Fast J

Fast J est un code de calcul des taux de photolyse développé en trois étapes. La première version de Fast J a été développée spécifiquement pour la troposphère, donc traitant le domaine spectral 289-850 nm. Par la suite, le domaine spectral a été étendu à 180-850 nm de manière à pouvoir traiter des réactions de photolyse se produisant dans la stratosphère. Enfin, la troisième version est une mise à jour de deux points importants : le traitement des nuages épais et le flux solaire incident.

Avec ce code, l'équation de transfert radiatif est résolue par une approche à 8 flux, bon compromis entre temps d'exécution et précision du calcul. En complément de cette méthode, l'introduction de fonctions de phase de diffusion non tronquées permet un traitement approprié des larges aérosols et hydrométéores. Ceci constitue un avantage sur les codes utilisant une projection sur une base de fonctions orthogonales. En effet, cette dernière méthode demande un nombre élevé de termes décrivant la fonction de phase de diffusion dans le cas des larges particules, impliquant donc une description parfois imprécise de cette diffusion.

Le gain de temps majeur vient du découpage de la portion du spectre électromagnétique considéré dans Fast J. La plupart des codes existant utilisent un pas fixe et fin pour l'intégration de

l'équation de transfert radiatif, ce qui implique un temps de calcul important, excluant un couplage en ligne d'un de ces codes avec, par exemple, un modèle de chimie-transport. L'approche utilisée dans Fast J est différente. Les différentes bandes de longueur d'onde ont été rassemblées en un nombre réduit de bandes suivant une démarche qui minimise l'erreur sur le calcul du taux de photolyse pour les principales espèces, dont l'ozone. Ainsi, avec un découpage du domaine spectral 180-850 nm en seulement 18 bandes, Fast J effectue un calcul précis des taux de photolyse suffisamment rapidement pour pouvoir être couplé en ligne avec le modèle météorologique et chimique.

#### II.4.4.3 Fast TUV

Fast TUV a été développé dans une optique similaire à celle de Fast J. Ce code utilise les mêmes processus physiques que sa version non simplifiée, TUV, mais décrit le domaine spectral 121-750 nm en seulement 17 bandes, devenant ainsi 8 fois plus rapide que TUV. La différence entre les taux de photolyse calculés par Fast TUV et ceux calculés par TUV est généralement inférieur à 5% dans la troposphère. Cette faible différence est possible grâce à l'introduction dans Fast TUV d'une fonction de correction dépendante de la colonne totale d'ozone  $TO_3$ , de l'angle zénital  $Z_\theta$  et de la température  $T$ . Le taux de photolyse effectivement calculé est donné par :

$$J_{FTUV} = J_{17} \cdot [1 + f(TO_3, Z_\theta, T)] \quad (\text{II.4.5})$$

Où  $J_{17}$  est le taux de photolyse calculé uniquement avec les 17 bandes. Fast TUV a été développé principalement pour la chimie troposphérique. Cela se traduit par l'omission de fréquences de photolyses propres au dioxygène, au  $N_2O$  ou encore aux CFC. Cela se traduit également dans le choix des bandes utilisées. La résolution est fine dans le domaine 200-300 nm, et plus particulièrement dans les domaines 200-220 nm et 300-310 nm du fait de la forte variabilité de l'absorption par l'ozone et  $O_2$  (dans le premier domaine) à ces longueurs d'onde et des variations fortes du flux dans la troposphère que cela induit. Au-delà de 330 nm, la résolution est plus grossière car l'absorption par l'ozone et les autres espèces est relativement mineure, ce qui implique des variations du flux troposphérique plutôt lentes.

Ce code de calcul des taux de photolyse a été utilisé par Tie *et al.* (2003) pour montrer l'importance de l'effet des nuages sur la photolyse. Les auteurs ont notamment montré que la prise en compte de l'effet des nuages augmente d'environ 20% la moyenne globale de la concentration du radical  $OH$ . Cela a un effet sur la durée de vie du méthane, qui est de 11 ans si l'on utilise les conditions de ciel clair, et de 9 ans si l'on prend en compte l'effet des nuages, cette dernière valeur étant d'avantage en accord avec les études menées sur le temps de vie du méthane.

### II.4.5 Paramétrisations pour les espèces chimiques

L'étude de l'impact chimique de la convection requiert la description dans le modèle de plusieurs processus spécifiques ayant un impact important. Il s'agit de la production de  $NO_X$  par les éclairs, du lessivage et du dépôt sec.

#### II.4.5.1 Module de production de $NO_X$ par les éclairs

Une importante source de  $NO_X$  dans la troposphère tropicale en saison des pluies est la production par les éclairs. Sous l'effet du chauffage induit par les charges électriques, les molécules

de  $N_2$  et  $O_2$  se dissocient, permettant aux atomes d'azote de d'oxygène de se recombinaer sous la forme de  $NO$ .

Le module de production de  $NO_X$  par les éclairs utilisé dans le C-CATT-BRAMS est le même que celui utilisé dans l'ancienne version du modèle (RAMS-Chimie). Ce module, développé au LAMP par Foret (2003), est basé sur la paramétrisation proposée par Pickering *et al.* (1998). Cette paramétrisation calcule l'occurrence des éclairs et la production de  $NO_X$ . Elle se décompose en quatre étapes :

- évaluation du taux d'éclairs,
- détermination du type d'éclairs,
- localisation des éclairs dans le nuage,
- production de  $NO_X$ .

Le taux de production d'éclairs est directement proportionnel à la vitesse verticale maximum au sein du nuage (Price & Rind, 1992). Les éclairs sont divisés en éclairs intra-nuageux (IN) qui sont répartis uniformément entre le sommet du nuage et l'isotherme  $-15^\circ\text{C}$  et les éclairs nuage-sol (NS) qui sont placés entre le sol et l'isotherme  $-15^\circ\text{C}$ . Suivant les travaux de Price *et al.* (1997), Pickering *et al.* (1998) prennent une valeur de  $6.7 \cdot 10^{26}$  molécules par flash NS et 10 fois moins par flash IN.

#### II.4.5.2 Module de lessivage

Certaines espèces en phase gazeuse comme  $HNO_3$  sont solubles dans l'eau liquide. Dans l'atmosphère ces espèces peuvent être captées par les particules liquides présentes dans l'atmosphère. Lorsque ces espèces sont dissoutes dans les gouttes de pluie elles sont emportées par le flux de précipitations vers la surface. Ceci constitue un puits pour ces espèces. Le processus de lessivage doit être pris en compte à la fois dans la paramétrisation de la convection et dans la paramétrisation microphysique. La contribution du lessivage par la paramétrisation de la convection domine largement lorsque cette paramétrisation est utilisée.

Dans la paramétrisation de la convection, le terme de perte d'une espèce chimique en présence de particules liquides est proportionnelle à la constante de Henry effective de l'espèce chimique, au rapport de mélange en particules liquides (nuageuses et liquides), aux taux de pluie fournis par la paramétrisation et à la concentration gazeuse des espèces chimiques dans le nuage.

Pour la paramétrisation microphysique, le lessivage a été codé et est actuellement en cours de test. Il sera inclus dans la version opérationnelle du Chemistry-CATT-BRAMS.

#### II.4.5.3 Module de dépôt sec

De nombreuses espèces chimiques sont déposées sur la surface. Ce dépôt est pris en compte dans le CATT-BRAMS et le C-CATT-BRAMS. Il se concrétise par une perte des espèces chimiques dans la couche du modèle la plus proche du sol proportionnellement à la vitesse de dépôt de l'espèce chimique. Cette vitesse de dépôt est calculée par une méthode analogue à la loi d'Ohm pour les circuits électriques faisant intervenir la résistance de surface définie par Wesely (1989). La résistance de surface dépend de la constante de Henry effective en admettant un pH égal à 7 pour les espèces

solubles, d'un facteur d'oxydation des substances biologiques par les espèces chimiques (maximum pour l'ozone et  $H_2O_2$ ) et de coefficients dépendant de la couverture du sol et de la saison.

## II.4.6 Conditions initiales et aux limites

L'initialisation des champs chimiques est nécessaire à la réalisation d'une simulation. Les données utilisées lors de cette procédure proviennent d'un modèle de chimie-transport global tel le modèle MOCAGE. De même que le forçage des champs météorologiques est essentiel pour le réalisme des simulations, celui des champs chimiques est requis pour obtenir des résultats réalistes. Une procédure de prise en compte des champs chimiques globaux similaire à celle des sorties météorologiques des modèles globaux a donc été développée. Ainsi, l'information sur la répartition à l'échelle synoptique des espèces chimiques est introduite à l'initialisation, permettant par exemple la prise en compte dans le modèle de gradients méridiens de concentration. L'évolution des structures synoptiques est introduite lors du forçage, autorisant ainsi la prise en compte dans la simulation de la distribution à grande échelle des espèces chimiques.

## II.5 Contributions au C-CATT-BRAMS

Lors de ma première année de ma thèse, j'ai contribué au développement du C-CATT-BRAMS sur deux points. D'une part, j'ai choisi les cadastres d'émissions utilisés par le modèle C-CATT-BRAMS et j'ai effectué la mise en forme des fichiers pour le préprocesseur pour les émissions. D'autre part, j'ai effectué la validation de Fast J pour les latitudes tropicales et j'ai procédé à la mise à jour de ce code. J'ai également introduit dans ce code deux espèces chimiques supplémentaires nécessaires pour l'une des réactions de photodissociation présente dans le schéma chimique.

### II.5.1 Cadastres d'émissions

Les cadastres d'émissions sont fournis par des bases de données. De nouveaux cadastres sont disponibles depuis quelques années, et ceux existants sont régulièrement revus. Ainsi, la version opérationnelle du modèle CATT-BRAMS utilisait la base de données EDGAR 2.0. Depuis, plusieurs autres bases ont fait leur apparition, et EDGAR a été actualisée (version 2000ft3.2). Il a donc été nécessaire de mettre à jour les données utilisées par le modèle. Pour cela, j'ai choisi parmi les bases de données disponibles celle qui répondait le mieux aux exigences suivantes :

- être récente
- avoir une bonne résolution spatiale
- avoir une bonne résolution temporelle
- avoir un nombre d'espèces chimiques suffisant pour le schéma chimique utilisé

#### II.5.1.1 Choix des bases de données

On peut trouver quatre bases de données différentes, apportant chacune diverses informations, et ayant chacune leur propre résolution spatiale et temporelle. Il a fallu choisir parmi les données disponibles celles qui permettent d'obtenir les émissions les plus réalistes possibles. Les quatre bases de données disponibles sont les suivantes :

- RETRO<sup>4</sup> (REanalysis of TROposheric chemical composition over the past 40 years)
- EDGAR<sup>5</sup> (Ensemble Database for Global Atmospheric Research)
- GEIA<sup>6</sup> (Global Emissions Inventory Activity)
- POET<sup>7</sup> (Present and future surface emissions of atmospheric compounds)

Leurs caractéristiques sont résumées dans le tableau II.5.1.

Nom	Résolution spatiale	Résolution temporelle	Catégories d'émissions	Nombre d'espèces
RETRO	0,5°x0,5°	mensuelle	anthropogéniques feux de biomasse	27 27
EDGAR	1°x1°	annuelle	anthropogéniques feux de biomasse	8 8
GEIA	1°x1°	annuelle saisonnnière	anthropogénique naturelles	16 3
POET	1°x1°	annuelle mensuelle mensuelle	anthropogénique feux de biomasse naturelles	15 15 9

TAB. II.5.1 – Résumé des caractéristiques des différentes bases de données.

La base de données la plus fine spatialement et temporellement est la base de données RETRO, avec un résolution spatiale de 0.5° et une résolution temporelle mensuelle. De plus, le nombre d'espèces répertoriées est important. Ainsi, c'est cette base que nous utilisons pour les émissions anthropiques. Pour les émissions liées aux feux de biomasse, nous n'avons pas modifié le modèle opérationnel, nous utilisons les données fournies par le modèle 3BEM. Pour les émissions naturelles, seules les bases de données GEIA et POET fournissent des données. Nous avons opté pour la base de données POET, plus récente que GEIA et détaillant d'avantage d'espèces.

## II.5.2 Validation et mise à jour de Fast J

### II.5.2.1 Validation

Avant de coupler en ligne Fast J au modèle météorologique et chimique, il est important de vérifier la validité des taux de photolyse calculés, compte-tenu de l'utilisation du code Fast J « en ligne » avec un modèle méso-échelle et non avec un modèle global de chimie-transport. Pour cela, j'ai utilisé le code de référence TUV qui utilise un pas fixe et fin pour la résolution de l'équation de transfert radiatif et qui propose plusieurs schémas de résolution, allant de 2 à 32 flux.

Pour effectuer la validation, il est important de bien poser les conditions de comparaison, afin que celles-ci mettent en évidence les différences dues à la méthode de résolution de l'équation de transfert radiatif, et non aux données climatologiques<sup>8</sup> utilisées, ou encore au traitement des aérosols et des hydrométéores. Dans Fast J, les données climatologiques ont une résolution spatiale d'environ 10° par 10° et une résolution temporelle mensuelle. Ainsi, la région nous intéressant se situant en Amérique du Sud et la période nous intéressant étant le mois de février, nous avons

<sup>4</sup><http://nadir.nilu.no/retro/>

<sup>5</sup><http://www.mnp.nl/edgar/>

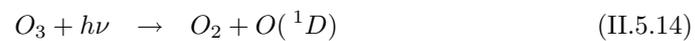
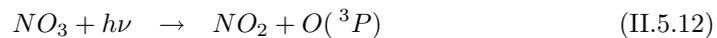
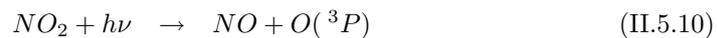
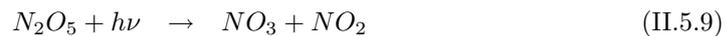
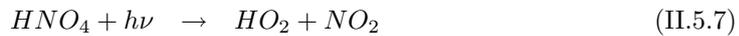
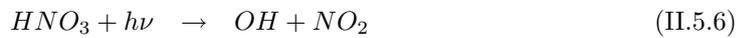
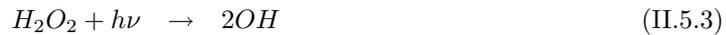
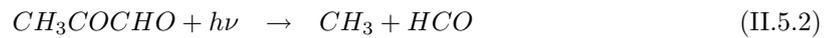
<sup>6</sup><http://www.geiacenter.org>

<sup>7</sup><http://www.aero.jussieu.fr/projet/ACCENT/POET.php>

<sup>8</sup>Les données climatologiques donnent la distribution verticale moyenne des principaux composés atmosphériques, de la température et de la pression pour une région donnée et une période donnée.

extrait de Fast J les données climatologiques correspondantes et nous les avons introduites dans TUV. De cette manière, les deux codes utilisent les mêmes données climatologiques. Pour nous affranchir des différences de traitement des aérosols et des hydrométéores entre les deux codes, nous avons utilisé les conditions dites « de ciel clair » : sans aucun nuage ni aérosol. Les différences de traitement des aérosols et des hydrométéores n'interviennent donc plus, nous permettant ainsi de comparer directement la méthode de résolution.

Le choix des espèces et des réactions est aussi très important. En effet, le découpage du spectre électromagnétique fait par Fast J peut avoir un impact important sur la valeur du taux de photolyse pour une espèce dont la section efficace varie fortement avec la longueur d'onde. Les espèces choisies doivent donc être d'une part communes aux deux codes de calcul et d'autre part nous permettre de parcourir plusieurs ordres de grandeur du taux de photolyse. Ce dernier point nous permet de valider le comportement de Fast J pour des espèces et des réactions de sensibilité différente au rayonnement incident. Compte-tenu de ces contraintes, nous avons retenu les réactions suivantes, au nombre de 14 :



$O(^3P)$  est l'oxygène dans son état fondamental et  $O(^1D)$  est l'oxygène dans un état excité. Contrairement à TUV, Fast J fournit la somme des taux de photolyse de  $NO_3$ .

Le taux de photolyse variant fortement à l'aube et à l'aurore, nous avons effectué le calcul sur 24 heures. Le résultat de Fast J étant un profil vertical de taux de photolyse et celui de TUV la valeur de J à l'altitude choisie, nous avons d'une part choisi le point de la grille de points disponible dans Fast J le plus proche du lieu inclu dans le domaine de simulation et pour lequel nous disposons de données. D'autre part, nous avons choisi deux altitudes représentatives de la portion d'atmosphère que nous souhaitons simuler (au sol et à environ 15 km d'altitude). Ceci permet de s'assurer de la validité du calcul pour des altitudes élevées pour lesquelles le flux incident peut changer pour

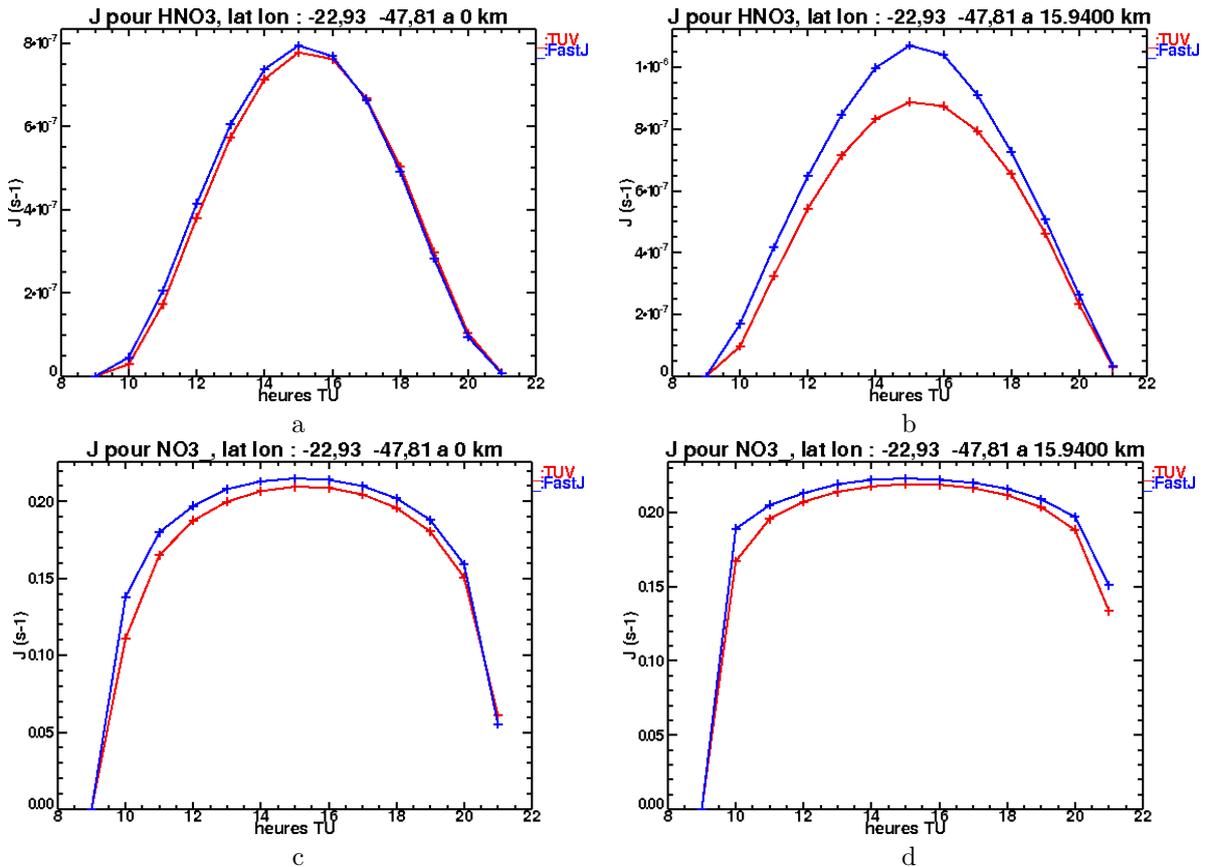


FIG. II.5.1 – Comparaison entre TUV (rouge) et Fast J (bleu) pour  $HNO_3$  ( $J$  de l'ordre de  $10^{-7} s^{-1}$ , a : au sol et b : à 15.94 km) et  $NO_3$  ( $J$  de l'ordre de  $10^{-1} s^{-1}$ , c : au sol et d : à 15.94 km). L'heure (heure TU) est en abscisse et  $J$  ( $s^{-1}$ ) en ordonnée. Le calcul a été fait à une longitude de  $-47.81^\circ E$ , ce qui induit une différence de 3 h12 mn entre l'heure TU et l'heure locale.

certaines longueurs d'onde.

Les résultats pour  $HNO_3$  et  $NO_3$  sont montrés sur la figure II.5.1. Les valeurs de  $J$  fournies par Fast J sont proches de celles calculées par TUV pour les deux ordres de grandeur extrêmes ( $10^{-7} s^{-1}$  pour  $HNO_3$  et  $10^{-1} s^{-1}$  pour  $NO_3$ ). L'ordre de grandeur de  $J$  ne semble donc pas être une source d'erreur dans les calculs des taux de photolyse dans Fast J. L'évolution des taux de photolyse au cours de la journée est également correctement reproduite. Ceci est illustré par l'ensemble des figures fournies en annexe. En moyenne sur l'ensemble des tests effectués, le coefficient de corrélation est de 0.99 au sol et à 15.94 km, indiquant une évolution journalière correcte du taux de photolyse calculé par Fast J.

Pour les deux altitudes utilisées, les résultats sont globalement satisfaisants, l'écart relatif moyen sur une journée entre Fast J et TUV étant compris entre  $-11\%$  et  $30\%$ . On peut toutefois noter que l'écart relatif tend à être un peu plus élevé à haute altitude. Les écarts relatifs au sol sont situés entre  $-8\%$  et  $13\%$  tandis que ceux à 15.94 km sont situés entre  $-11\%$  et  $30\%$ , ce résultat dépendant des réactions considérées.

Il existe cependant trois exceptions aux résultats donnés ci-dessus. Les valeurs de  $J$  fournies par

Fast J pour les réactions de photolyse des molécules  $CH_3CHO$ ,  $CH_3COCHO$  et  $HNO_4$  s'écartent notablement des valeurs calculées par TUV (d'au moins 50% pour l'une des altitudes et jusqu'à un facteur 7) (figure II.5.2).

Pour  $CH_3CHO$ , l'explication de ces écarts n'apparaît pas clairement, ni dans les données de l'IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry, <http://www.iupac-kinetic.ch.cam.ac.uk>) ni dans l'évaluation du Jet Propulsion Laboratory (JPL, Sander *et al.* 2006). Il est possible qu'une dépendance en pression de la section efficace de photodissociation prise en compte dans TUV et non dans Fast J en soit à l'origine. Cette dépendance n'est pas indiquée dans les bases de données.

Les écarts observés pour  $CH_3COCHO$  pourrait s'expliquer par la dépendance en pression des rendements quantiques prise en compte dans Fast J. Ceci est appuyé par les données de l'IUPAC datant de 2003 ainsi que par l'évaluation n°15 datant de 2006 du JPL.

Enfin, concernant la réaction de photolyse de  $HNO_4$ , les écarts observés entre Fast J et TUV ont pour origine la section efficace. Il existe un domaine d'absorption pour les grandes longueurs d'onde (au-delà de 600 nm) qui est bien pris en compte dans Fast J, mais pas dans TUV. L'évaluation de 2006 du JPL fait effectivement état d'une région d'absorption centrée sur 13105  $cm^{-1}$  et d'autres nombres d'ondes inférieurs, et les commentaires donnés par l'IUPAC (datant de 2001) évoquent également une zone d'absorption dans la partie visible du spectre électromagnétique. Les différences observées sont maximales au sol car les longueurs d'onde mises en jeu sont parmi celles que l'atmosphère transmet le mieux et prennent donc une importance relative plus grande que les courtes longueurs d'onde. Une faible augmentation de la section efficace aux grandes longueurs d'onde se traduira par une forte augmentation du taux de photolyse, comme le montrent les figures II.5.2 e et II.5.2 f. Pour vérifier la concordance des résultats de Fast J, la section efficace pour les grandes longueurs d'onde a donc été prise nulle, comme pour TUV. En procédant ainsi, il apparaît que les valeurs de Fast J et de TUV sont très proches (figure II.5.3).

### II.5.2.2 Mise à jour et ajouts

Les sections efficaces utilisées dans Fast J ont été mises à jour à partir de données de l'IUPAC ou de l'évaluation du JPL. Étant donné que Fast J date de l'année 2002, seules les espèces dont les données sont plus récentes ont été mises à jour. Elles sont au nombre de trois : PAN (Péroxy-Acétyle Nitrate), MEK (Methyl-Ethyle Ketone) et MGLxl (MethylGlyoxal).

La mise à jour est faite à partir d'outils fournis par les auteurs de Fast J. Elle se déroule de la manière suivante. Les données initiales (venant de l'IUPAC ou du JPL, de résolution allant de 1 à 5 nm) sont interpolées tous les 10  $cm^{-1}$ , résolution correspondant à celle des données de flux solaire utilisées par Fast J. Ces données interpolées sont ensuite moyennées sur les 18 bandes de Fast J en deux étapes : d'abord sur les 77 bandes spectrales du modèle de l'UCI (University of California, Irvine), puis sur les 18 bandes de Fast J. La figure II.5.4 montre les résultats obtenus pour les trois espèces mises à jour.

Compte-tenu des espèces utilisées dans le schéma chimique RACM, il a fallu ajouter dans Fast J les espèces nécessaires pour le calcul du taux de photolyse des nitrates organiques. Pour faire ce

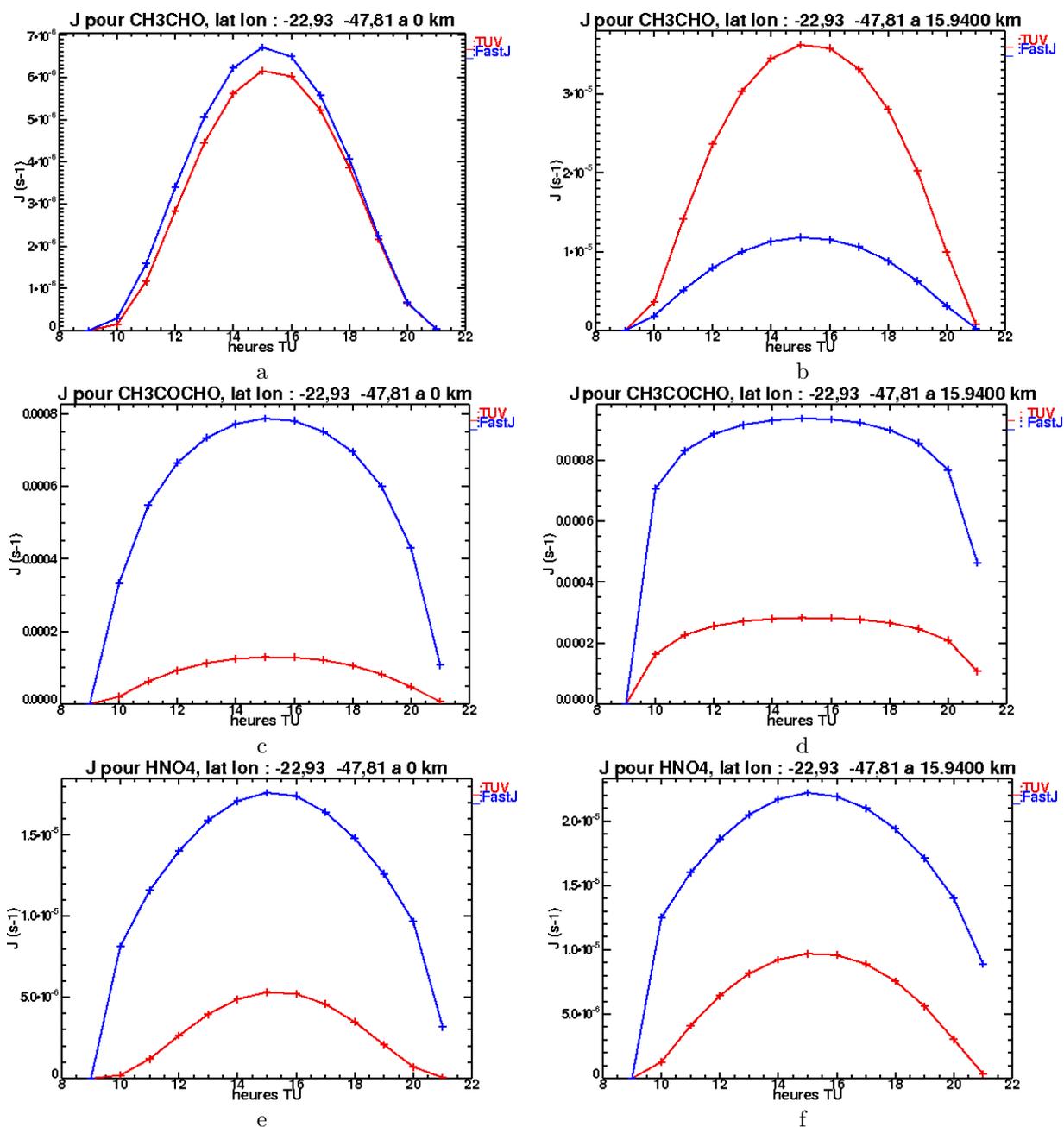


FIG. II.5.2 – Comparaison entre TUV (rouge) et Fast J (bleu) pour  $\text{CH}_3\text{CHO}$  (a : au sol et b : à 15.94 km),  $\text{CH}_3\text{COCHO}$  (c : au sol et d : à 15.94 km) et  $\text{HNO}_4$  (e : au sol et f : à 15.94 km). L'heure (heure TU) est en abscisse et  $J$  ( $\text{s}^{-1}$ ) en ordonnée. La différence entre l'heure TU et l'heure locale est la même que sur la figure II.5.1.

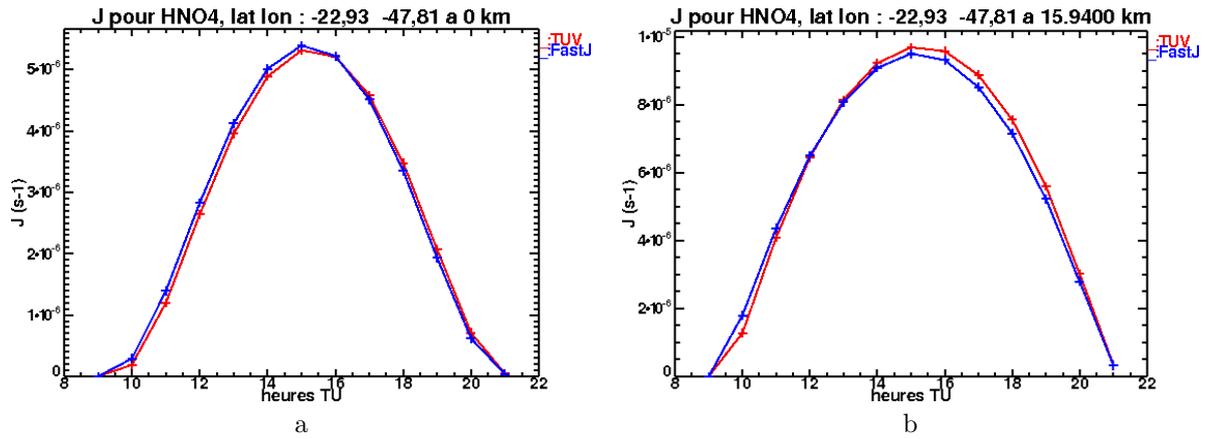


FIG. II.5.3 – Comparaison entre TUV (rouge) et Fast J (bleu) pour  $HNO_4$  après modification de la section efficace utilisée par Fast J (a : au sol et b : à 15.94 km). L'heure (heure TU) est en abscisse et  $J$  ( $s^{-1}$ ) en ordonnée. La différence entre l'heure TU et l'heure locale est la même que sur la figure II.5.1.

calcul, les espèces i-propylnitrate et n-propylnitrate ont été utilisées, comme suggéré dans Stockwell *et al.* (1997). Connaissant le taux de photolyse pour ces deux espèces, celui des nitrates organiques peut être calculé de la façon suivante :

$$J_{ONIT} = 0.2 * J_{n-pn} + 0.8 * J_{i-pn} \quad (\text{II.5.15})$$

où  $J$  est le taux de photolyse et où *ONIT* signifie « Organic NITrate » et  $n - pn$  et  $i - pn$  respectivement n-propylnitrate et i-propylnitrate.

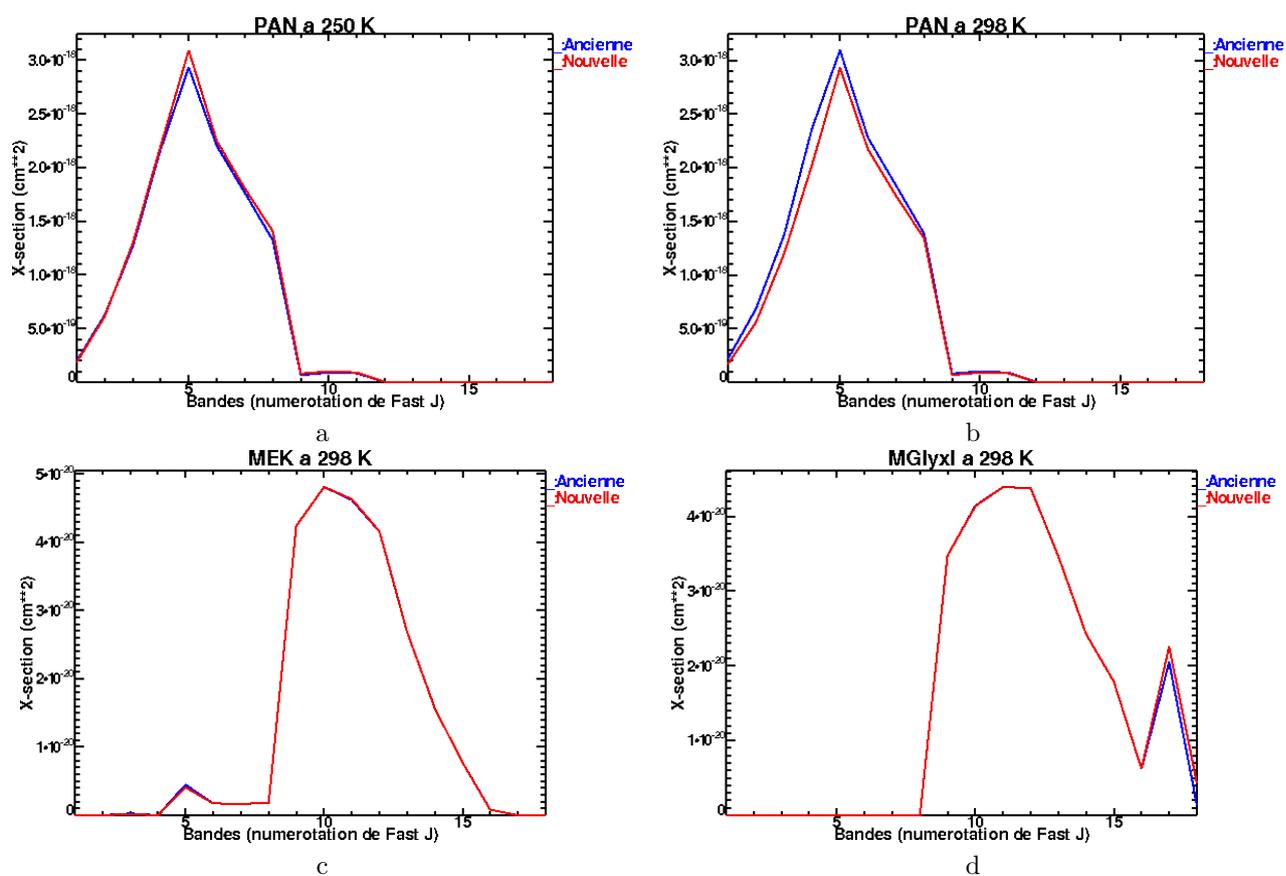


FIG. II.5.4 – Sections efficaces de photodissociation avant (bleu) et après (rouge) mise à jour pour le PAN (a : 250 K et b : 298 K), le MEK (c) et le MGlyxl (d) en fonction des bandes spectrales de Fast J.

---

---

## CHAPITRE III

---

# Mesures utilisées

---

**Table des matières**

---

<b>III.1 Mesures de la campagne coordonnée de 2004</b>	
<b>HIBISCUS-TROCCINOX-TROCCIBRAS . . . . .</b>	<b>59</b>
III.1.1 Mesures HIBISCUS . . . . .	59
III.1.2 Mesures TROCCINOX . . . . .	60
III.1.3 Mesures TroCCiBras . . . . .	63
<b>III.2 Produits satellitaires . . . . .</b>	<b>64</b>
III.2.1 Taux de précipitations de TRMM et de GPCP . . . . .	64
III.2.2 Mesures de la concentration en monoxyde de carbone par MOPITT . .	64

---

L'exploitation des résultats d'un modèle météorologique avec ou sans transport de traceurs ou chimie passe nécessairement par la comparaison à des mesures. Cela permet de valider le comportement du modèle à l'endroit et à l'instant des mesures avant d'étendre l'exploitation de ces résultats à l'ensemble du domaine couvert et sur toute la durée de la simulation. Cependant, utiliser des données requiert une connaissance suffisante de leur qualité et de leurs biais éventuels liés à la méthode de mesure employée. La prise en compte de la qualité des données pour l'interprétation des résultats est en effet un problème important (on peut par exemple citer les travaux de Gaffen *et al.*, 2000). Je détaille ici les données utilisées au cours de ma thèse. Ces données proviennent de la campagne coordonnée de 2004 des projets HIBISCUS, TROCCINOX et TROCCIBRAS et d'instruments satellitaires.

### III.1 Mesures de la campagne coordonnée de 2004 HIBISCUS-TROCCINOX-TROCCIBRAS

Lors de la période convective de l'année 2004, une campagne de mesures coordonnée au Brésil a été réalisée pendant les mois de février et mars dans le cadre de trois projets. Les trois projets sont HIBISCUS, TROCCINOX (TROpical Convection, Cirrus and Nitrogen OXides experiment) et TROCCIBRAS (TROpical Convection and CIrrus experiment BRAsil).

#### III.1.1 Mesures HIBISCUS

L'objectif général du projet HIBISCUS<sup>1</sup> (2004-2005, Pommereau *et al.*, 2007) était l'étude de la dynamique, de la microphysique et des processus radiatifs et chimiques dans la haute troposphère et la basse stratosphère tropicale (UTLS) liées à la convection profonde. De manière plus détaillée les objectifs étaient :

- étudier le transport vertical et horizontal dans l'UTLS,
- vérifier la qualité des analyses météorologiques globales opérationnelles pour les tropiques (température et vent),
- étudier les mécanismes contrôlant la quantité de vapeur d'eau atteignant la stratosphère,
- étudier l'impact des polluants transportés sur la chimie des espèces actives à courte durée de vie,
- étudier l'impact des aérosols sur la formation des cirrus sub-visibles à la tropopause et leur impact sur la chimie et le bilan radiatif,
- valider les mesures de concentration par satellite (ODIN, ESA-ENVISAT, NASA-SAGE III).

HIBISCUS est un projet européen comportant une partie mesures (campagnes ballons et satellite) et une partie modélisation.

Au cours de cette campagne, le spectromètre  $\mu$ -SDLA (Durry & Mégie, 1999, 2000; Durry *et al.*, 2004) a été lancé sous-ballon depuis Bauru pour mesurer les concentrations en eau, méthane et dioxyde de carbone dans la troposphère et la basse stratosphère tropicale. L'instrument  $\mu$ -SDLA utilise trois diodes laser InGaAs émettant dans le proche infra-rouge respectivement à  $1.39 \mu\text{m}$  ( $\text{H}_2\text{O}$ ),  $1.60 \mu\text{m}$  ( $\text{CO}_2$ ) et  $1.65 \mu\text{m}$  ( $\text{CH}_4$ ). Ces diodes sont reliées par fibre optique à une cellule multi-passages ouverte sur l'atmosphère et qui fournit un parcours optique de  $28 \text{ m}$ . Les concentra-

---

<sup>1</sup>[www.aerov.jussieu.fr/projet/HIBISCUS](http://www.aerov.jussieu.fr/projet/HIBISCUS)

tions sont déduites en utilisant la loi de Beer-Lambert, la pression et la température in situ et le modèle moléculaire adéquat (Durry & Mégie, 1999). Concernant la vapeur d'eau,  $\mu$ -SLA possède une dynamique de mesure de quatre ordre de grandeur d'amplitude, ce qui lui permet de mesurer continûment l'eau dans la troposphère et dans la basse stratosphère malgré les fortes disparités de concentration entre ces deux régions de l'atmosphère (Durry & Mégie, 2000). Le rapport de mélange en vapeur d'eau est déduit du spectre d'absorption en ajustant une fonction à la raie moléculaire complète grâce à la méthode des moindres carrés non-linéaire et grâce aux paramètres moléculaires révisés par Parvitte *et al.* (2002) et Durry & Hauchecorne (2005). L'incertitude de mesure sur la concentration en eau s'étend de 5 à 10%. Pour le vol utilisé dans cette thèse (le vol SF2), la résolution temporelle de l'instrument pour la vapeur d'eau était d'une mesure par seconde. Les mesures de vapeur d'eau ont été effectuées durant la nuit lors de la descente lente de la nacelle afin d'éviter de polluer les mesures par le dégazage de l'enveloppe du ballon (Durry & Mégie, 2000; Durry *et al.*, 2004). Les données sur la vapeur d'eau dans la moyenne troposphère ont été obtenues sous parachute après largage de la nacelle (Durry *et al.*, 2004).

Dans le cadre de cette campagne, des sondes ozones ont également été lancées régulièrement depuis Bauru entre le 10 et le 24 février. Ces sondes sont constituées de cellules à solution électrochimique standart. Elles utilisent 3 *mml* de solution *KI*-cathode à 1% pour estimer la concentration en ozone avec une précision de l'ordre de 5% (Komhyr *et al.*, 1995).

### III.1.2 Mesures TROCCINOX

L'objectif du projet européen TROCCINOX<sup>2</sup> (2004-2005) est d'améliorer nos connaissances générales sur les  $NO_x$  produits par les éclairs : quantifier la quantité de  $NO_x$  produite au cours des orages tropicaux et la comparer aux quantités de  $NO_x$  émises par les autres sources afin de quantifier son impact à l'échelle global (Huntrieser *et al.*, 2008). L'autre principal sujet d'étude du projet concerne le transport de gaz trace dont la vapeur d'eau et de particules de glace ou d'aérosols dans la haute troposphère et la basse stratosphère par la convection profonde tropicale et par les ascendances de grande échelle. Pour mener à bien ces objectifs, des mesures à différentes échelles spatiales ont été faites, ainsi que des simulations numériques des phénomènes observés afin d'améliorer notre compréhension de ces processus et de quantifier leur impact à l'échelle locale comme à l'échelle globale.

Les principales mesures effectuées lors des campagnes du projet TROCCINOX sont aéroportées. Pour la campagne de 2004, seul le Falcon (avion allemand de la DLR) était disponible. Les grandeurs météorologiques mesurées sont principalement la température, la vitesse et la direction du vent et l'humidité spécifique. D'autres grandeurs sont également mesurées (concentration en  $CO$ , en  $NO_x$ , quantité d'aérosols par exemple). Dans le cadre de la campagne TROCCINOX, l'objectif prioritaire étant l'étude de la production de  $NO_x$  par les éclairs lors des orages tropicaux, les paliers suivis par le Falcon étaient majoritairement à une altitude située entre 10 et 12 *km* et traversaient régulièrement les sorties de nuages convectifs (Huntrieser *et al.*, 1998; Höller *et al.*, 1999; Huntrieser *et al.*, 2002).

Les mesures faites à l'aide des instruments embarqués à bord du Falcon sont recensées sur la

---

<sup>2</sup>[www.pa.op.dlr.de/troccinox](http://www.pa.op.dlr.de/troccinox)

figure III.1.1 (a). Les 14 trajectoires que nous avons utilisées sont montrées sur la figure III.1.1 (b), le tableau III.1.1 donnant un résumé des conditions rencontrées lors de ces vols. Les instruments embarqués à bord du Falcon sont capables d'effectuer des mesures avec une haute résolution temporelle (entre 1 et 5 s de temps d'intégration). Les mesures que nous avons utilisées sont effectuées toutes les secondes. La vitesse moyenne de l'avion étant d'environ 190 m/s au sein des masses d'air, cela assure également une résolution spatiale fine, de l'ordre de 200 m.

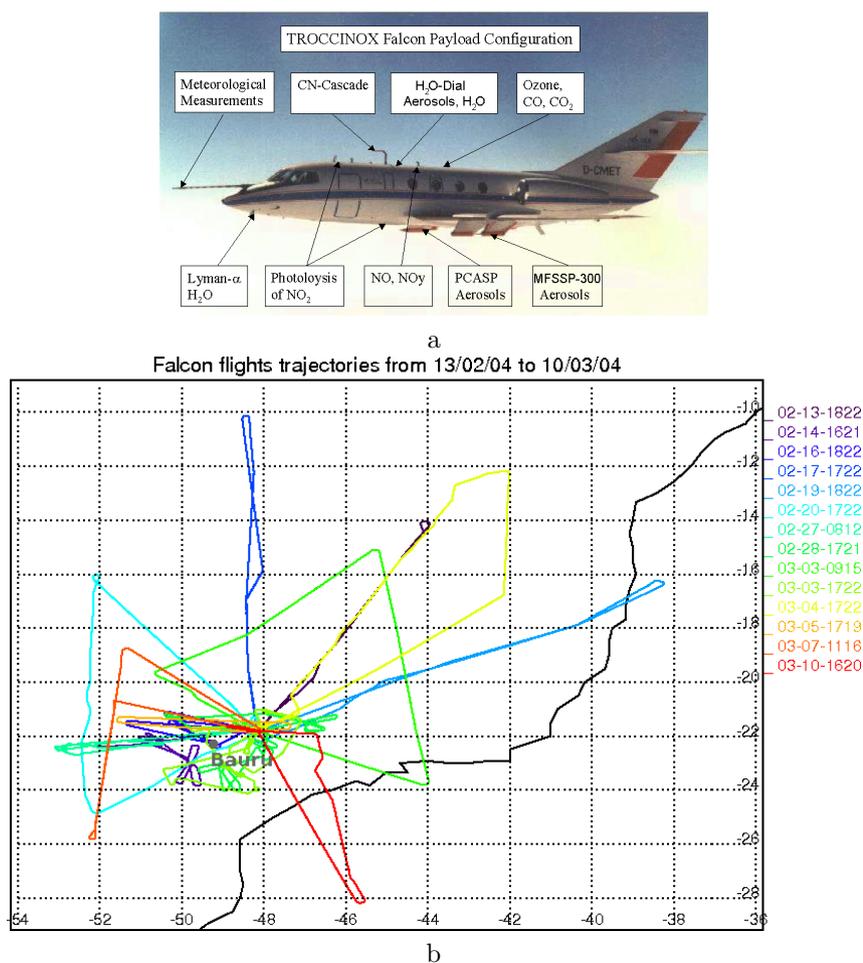


FIG. III.1.1 – Instruments embarqués à bord de l'avion Falcon du DLR (a, image du site internet de TROCCINOX) et projection au sol des trajectoires suivies par le Falcon lors des vols de la campagne de 2004 et dont nous avons utilisé les données (b).

Vol	Date	Heure TU	Conditions
1	13/02/04	18 : 40-21 : 40	Sondage de masses d'air au nord et au sud de la zone de convergence
2	14/02/04	16 : 50-20 : 15	Sondage de nuages orageux
3	16/02/04	18 : 55-21 : 39	Sondage de masses d'air non-affectées par la convection
4	17/02/04	17 : 55-21 : 55	Masses d'air différentes affectées / non-affectées par la convection tropicale
5	19/02/04	18 : 06-21 : 45	Masses d'air différentes affectées / non-affectées par la convection tropicale
6	20/02/04	17 : 39-21 : 31	Masses d'air différentes affectées / non-affectées par la convection tropicale
7	27/02/04	08 : 44-11 : 48	
8	28/02/04	17 : 08-20 : 48	Sondage d'une cellule orageuse isolée
9	03/03/04	09 : 58-14 : 06	Sondage de masses d'air précédemment affectées par la convection tropicale
10	03/03/04	17 : 19-21 : 08	Sondage de nuages orageux
11	04/03/04	17 : 15-21 : 19	Deuxième sondage des masses d'air sondées lors du vol précédent
12	05/03/04	17 : 03-18 : 59	Sondage de masses d'air non-affectées par la convection tropicale
13	07/03/04		Conditions principalement sans nuages
14	10/03/04		

TAB. III.1.1 – Tableau récapitulatif des conditions rencontrées lors des vols avions du Falcon. Données provenant du site internet de TROCINOX. Les données manquantes dans le tableau correspondent à l'absence de données dans le document.

L'incertitude typique sur les mesures utilisées est de l'ordre de 10%, en particulier pour les mesures de la concentration en monoxyde de carbone, mesurée par fluorescence (Gerbig *et al.*, 1999; Baehr *et al.*, 2003; Huntrieser *et al.*, 2005). Les mesures météorologiques de température, de vitesse et direction du vent et d'humidité sont fournies par l'instrumentation de référence du Falcon (Schumann *et al.*, 1995). L'humidité est mesurée à l'aide de trois instruments (miroir à température du point de rosée, un capteur capacitif et un instrument de mesure par absorption Lyman Alpha) et n'est pas fournie si l'incertitude de mesure dépasse 30%.

### III.1.3 Mesures TroCCiBras

Le principal objectif de la campagne TroCCiBras<sup>3</sup> était d'obtenir de nombreuses mesures couvrant l'ensemble de la troposphère et la basses stratosphère afin de répondre aux besoins des instituts de recherche brésiliens. Ces mesures contribuent à l'amélioration de la connaissance générale de l'atmosphère au-dessus de l'état de São Paulo et permettent d'atteindre les deux objectifs principaux de la campagne TroCCiBras : la validation des mesures satellitaires et l'amélioration des méthodes employées en prévision météorologique opérationnelle. En particulier, les données recueillies ont permis de tester le BATTRAM (Brazilian Atmospheric Tracer Transport Model), l'une des premières versions du CATT-BRAMS.

Les radio-sondages que nous avons utilisés ont été lancés depuis Bauru (22°18'54"S et 49°03'39"O) au Brésil. Étant lancés dans le cadre de la campagne TroCCiBras, leur fréquence est plus élevée que celle des radio-sondages opérationnels (toutes les 6 heures environ). Il est à noter qu'ils n'ont pas été assimilés dans les analyses que nous avons utilisées. Les instruments de mesures sont placés sous un ballon et l'ensemble est ensuite lâché dans l'atmosphère. Les mesures effectuées sont la pression, la température, l'humidité et la force et la direction du vent (radio-sondages de type PTU-v). Les radio-sondages lancés depuis Bauru sont des sondes de type VAISALA RS80-A<sup>4</sup>. Avec une vitesse d'ascension moyenne d'environ 5 m/s et une mesure toutes les 10 s, la résolution verticale primaire est d'une cinquantaine de mètres. Cependant, pour certaines mesures, le temps de réponse est long, dégradant la résolution verticale réelle des mesures effectuées. C'est en particulier le cas du capteur d'humidité dont le temps de réponse augmente fortement avec l'altitude.

Les mesures de pression, de température, de vitesse et de direction du vent ont une bonne précision. En revanche, les mesures d'humidité faites avec une sonde RS80-A dans la moyenne et haute troposphère ne sont pas de très bonne qualité avec un biais sec connu (Miloshevich *et al.*, 2001; Wang *et al.*, 2002; Turner *et al.*, 2003; Miloshevich *et al.*, 2003). En effet, le calcul de l'humidité à partir de la mesure brute du capteur suppose une variation linéaire avec la température de la réponse du capteur, ce qui est faux. Cela induit un biais important s'accroissant avec l'altitude. D'autre part, il a été montré (Eden & Jones, 2004) que le capteur répond mal lorsque l'humidité relative de la masse d'air qu'il sonde est inférieure à environ 10%. En conséquence, si l'on exploite les mesures faites en moyenne et haute troposphère par des radio-sondages utilisant ce capteur, il existe plusieurs corrections possibles et partielles du biais (Leiterer *et al.*, 2000; Miloshevich *et al.*, 2001; Wang *et al.*, 2002) à appliquer aux mesures en fonction des données disponibles et il est préférable de filtrer les valeurs d'humidité relative inférieures ou égales à 10%.

<sup>3</sup>[www.ipmet.unesp.br/troccibras](http://www.ipmet.unesp.br/troccibras)

<sup>4</sup><http://www.vaisala.com/weather/products/soundingequipment/radiosondes/rs80>

## III.2 Produits satellitaires

Afin de valider la simulation sur de plus grandes échelles spatio-temporelles, nous avons utilisé les produits satellitaires de TRMM et de GPCP pour les précipitations accumulées et les mesures de l'instrument MOPITT à bord du satellite TERRA de la NASA pour la concentration en monoxyde de carbone.

### III.2.1 Taux de précipitations de TRMM et de GPCP

Le produit de TRMM<sup>5</sup> que nous avons utilisé est le produit 3B42 (Huffman *et al.*, 2007). Ce produit est une combinaison des estimations du radiomètre micro-onde TMI de TRMM complétées spatialement par des estimations basées sur des mesures de radiances infrarouge de plusieurs autres satellites. Cette combinaison permet de fournir des champs de taux de pluie accumulée en surface toutes les trois heures sur une grille de 0.25° de longitude et de 0.25° de latitude dans la zone 50°S-50°N.

Les données provenant de GPCP<sup>6</sup> utilisent les estimations satellites de précipitations faites à partir de mesures infrarouge et micro-ondes de plusieurs satellites et de mesures in-situ récoltées par des stations de surface (Huffman *et al.*, 2001; Adler *et al.*, 2003). La résolution des produits GPCP est plus grossière que celle des produits TRMM : la résolution spatiale est de 1° et la résolution temporelle journalière.

### III.2.2 Mesures de la concentration en monoxyde de carbone par MOPITT

Les données satellites disponibles pour la période de simulation (février et mars 2004) et pour la troposphère proviennent de l'instrument MOPITT (Measurement of the Pollution In The Troposphere) embarqué à bord du satellite TERRA de la NASA (Pan *et al.*, 1998; Emmons *et al.*, 2003; Deeter *et al.*, 2003; Emmons *et al.*, 2004; Deeter *et al.*, 2007; Emmons *et al.*, 2007).

L'instrument MOPITT mesure au nadir la radiance sur plusieurs canaux pour connaître la concentration en CO intégrée sur la colonne d'atmosphère (Pan *et al.*, 1998; Deeter *et al.*, 2003). Pour déconvoluer cette mesure et retrouver la concentration sur plusieurs niveaux verticaux, un profil a priori est utilisé. Ce profil est issu d'une moyenne globale annuelle calculée à partir de mesures aéroportées et de sorties de modèles de chimie-transport (Deeter *et al.*, 2003). Dans la procédure d'inversion, on s'assure en utilisant ce profil a priori que les variations spatio-temporelles observées par MOPITT ne viennent pas du profil a priori, mais de variations réelles mesurées par l'instrument (Deeter *et al.*, 2003).

Les méthodes de mesures et d'inversion utilisées par MOPITT permettent de connaître la concentration de CO sur 7 niveaux de pression qui ne sont pas totalement indépendants les uns des autres. Cette dépendance d'un niveau aux autres niveaux, qui n'existe pas dans les mesures in situ, doit être ajoutée à ces mesures afin de pouvoir faire une comparaison objective entre les mesures de MOPITT et d'autres mesures (Pan *et al.*, 1998; Deeter *et al.*, 2003; Emmons *et al.*, 2004).

---

<sup>5</sup><http://trmm.gsfc.nasa.gov/>

<sup>6</sup><http://cics.umd.edu>

Pour cela, des noyaux de pondération sont fournis avec les données de MOPITT et doivent être appliqués aux mesures in situ. La forme et l'amplitude de ces noyaux de pondération dépendent du contraste de température entre la surface et l'air et de l'émissivité de la surface, ce qui induit de fortes variations spatio-temporelles (différences entre les continents et les océans, entre le jour et la nuit) (Deeter *et al.*, 2003; Emmons *et al.*, 2004). Cette dépendance à la température de surface induit également des conditions spécifiques pour lesquelles les mesures ne sont pas possibles : dans les zones où sont présents d'épais panaches de fumée ou qui sont fortement nuageuses. De plus, le satellite TERRA est défilant. C'est pour ces raisons (mesures en ciel clair et orbite défilante du satellite) que les produits journaliers et mensuels de MOPITT comportent des zones sans données.

Les incertitudes sur les concentrations mesurées par MOPITT sont d'environ 20% dans la zone intertropicale et pour les pressions inférieures à 500 *hPa* (Emmons *et al.*, 2004). Elles sont plus fortes pour les pressions supérieures (basse troposphère), pouvant atteindre 50%, notamment pour le niveau à la surface (1000 *hPa*) qu'il est préférable de ne pas utiliser.



---

---

## CHAPITRE IV

---

# Etude de la répartition du CO en période convective : analyse des résultats météorologiques

---

**Table des matières**

---

<b>IV.1 Objectifs scientifiques . . . . .</b>	<b>69</b>
<b>IV.2 Caractéristiques générales des simulations . . . . .</b>	<b>71</b>
IV.2.1 Période simulée . . . . .	72
IV.2.2 Résolutions spatiale et temporelle . . . . .	72
IV.2.3 Initialisation des champs météorologiques et forçage . . . . .	73
IV.2.4 Paramétrisations utilisées . . . . .	74
<b>IV.3 Description et analyse des résultats de la simulation de référence .</b>	<b>80</b>
IV.3.1 Description . . . . .	80
IV.3.2 Analyse des résultats météorologiques . . . . .	90

---

## IV.1 Objectifs scientifiques

Cette première étude porte sur l'impact dynamique de la convection sur la répartition du monoxyde de carbone en saison des pluies à l'aide du modèle CATT-BRAMS. L'impact dynamique de la convection doit être étudié car il détermine grandement l'évolution chimique au sein et à proximité de la convection. En effet, selon les paramétrisations utilisées, la hauteur d'injection, l'étendue horizontale de la colonne convective et la vitesse verticale maximale atteinte varient, influençant ainsi la quantité d'espèces emportée et les réactions chimiques entre ces espèces et la masse d'air au sein de laquelle elles sont injectées. Cette étude permet donc de détailler l'impact dynamique de la convection telle qu'elle est représentée dans le CATT-BRAMS et permet également la vérification de la bonne représentation du transport de traceurs dans le modèle en période convective. C'est cette même représentation du transport des espèces qui est utilisée dans le nouveau modèle avec chimie C-CATT-BRAMS. Enfin, ces travaux viennent compléter ceux menés par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) montrant que le modèle CATT-BRAMS est capable de généralement bien reproduire la répartition verticale de monoxyde de carbone en saison sèche. Ce modèle est utilisé opérationnellement pour la prédiction de la qualité de l'air en Amérique du Sud.

Dans leur étude, Freitas *et al.* (2007) présentent les principales caractéristiques du modèle CATT-BRAMS et évaluent ses performances sur une simulation des mois d'août, de septembre et d'octobre 2002. La configuration utilisée est la suivante : deux grilles sont imbriquées et ont une résolution horizontale de 140 km (grille 1) et de 35 km (grille 2). Le sommet du modèle est à 23 km avec 42 niveaux verticaux avec 150 m d'épaisseur pour la première couche et 850 m d'épaisseur maximale pour une couche. Les niveaux verticaux sont identiques sur les deux grilles. La durée de la simulation est de 135 jours à partir du 15 juillet 2002, qui inclut 15 jours de spinup. Freitas *et al.* (2007) comparent les résultats du modèle aux données acquises durant cette période au cours de la campagne de mesures Large scale Biosphere-Atmosphere (LBA) - Smoke Aerosols, Clouds, rainfall and Climate (SMOCC) et Radiation, Cloud and Climate interactions (RaCCL) (<http://lba.cptec.inpe.br>, Andreae *et al.* 2004). Les résultats météorologiques (température, rapport de mélange en vapeur d'eau, vent zonal et vent méridien) sont comparés à une série d'environ 6 radio-sondages par jour lancés depuis deux sites distants d'environ 80 km (soit environ 200 radio-sondages par site). Les auteurs montrent que l'accord entre le modèle et les données est bon statistiquement sur les trois mois de simulation. La comparaison entre les précipitations simulées et observées est ensuite faite. Les données de précipitations utilisées sont les données de GPCP. Les auteurs montrent qu'en moyenne sur trois mois les précipitations simulées sont en bon accord avec les précipitations observées. Ensuite, la concentration en monoxyde de carbone simulée est comparée aux mesures d'une station de surface, aux mesures aéroportées effectuées lors de 16 vols ainsi qu'aux données provenant de l'instrument MOPITT à bord du satellite TERRA de la NASA. Pour la période simulée, les principales sources de CO et d'aérosols sont les feux de biomasse. L'effet « plume-rise » associé constitue le principal processus de transport vertical. Il est montré que les valeurs instantanées du modèle à 12 :00 UTC sont en bon accord avec les moyennes journalières centrées sur 12 :00 UTC des mesures de la station de surface. Pour cette comparaison, les aérosols simulés sont comparés de la même manière aux mesures de la station de surface et sont également en bon accord avec les moyennes journalières des mesures. Les mesures aéroportées utilisées ont été acquises durant la campagne LBA SMOCC/RaCCL. L'altitude maximale atteinte au cours de ces vols est de 5 km. Il est montré que les profils verticaux moyens obtenus à partir du modèle sont

cohérents avec les profils verticaux moyens et l'écart-type obtenus à partir des mesures aéroportés vol par vol et en moyenne sur tous les vols. La comparaison entre la concentration en monoxyde de carbone simulée et celle observée par MOPITT montre qu'au dessus de 500 *hPa* le biais normalisé est compris entre -20% et 20% environ et est plus important pour les niveaux inférieurs, l'augmentation du biais normalisé à ces niveaux provenant à la fois des observations de MOPITT et du modèle. Les auteurs présentent ensuite deux cas d'étude avec de fortes émissions et du transport à distance pour lesquels l'accord entre le modèle et les observations satellites est bon. Freitas *et al.* (2007) concluent que le CATT-BRAMS reproduit de manière réaliste le transport de traceurs à l'échelle synoptique et régionale. La capacité du modèle à reproduire la distribution verticale des traceurs montre que la paramétrisation des processus de transport sous-maille est fiable.

Longo *et al.* (2007) présentent plus en détails le modèle de calcul des émissions de feux de biomasse 3BEM (émissions obtenues à partir de données satellitaires, voir la partie II.3.1), comparent les résultats obtenus avec les émissions issues de ce modèle sur la grille 2 avec 35 *km* de résolution aux résultats obtenus avec les inventaires d'émission de feux de biomasse d'EDGAR (2.5° de résolution spatiale) et de Duncan *et al.* (2003) (1° de résolution spatiale) et testent également l'impact de l'effet « plume-rise » sur la répartition du monoxyde de carbone. La configuration utilisée pour les grilles de calcul est identique à celle utilisée par Freitas *et al.* (2007). Longo *et al.* (2007) montrent, à travers la comparaison entre les valeurs moyennes journalières de la concentration de monoxyde de carbone mesurée à la surface et la valeur instantanée de la concentration simulée, que la variabilité temporelle ainsi que les valeurs de la concentration sont en meilleur accord avec les observations lorsque les émissions issues du modèle 3BEM sont utilisées. Les auteurs comparent également les résultats de la simulation avec les données aéroportées et montrent que la variabilité journalière et la concentration simulées sont en meilleur accord avec les mesures en utilisant le modèle d'émission 3BEM plutôt que les deux autres cadastres d'émissions. De plus, les auteurs montrent que l'utilisation de l'effet « plume-rise » améliore les résultats, notamment avec l'obtention dans la couche limite de quantités de CO plus réalistes que dans la simulation de référence. Lors de la comparaison aux données de MOPITT pour les niveaux de pression 700, 500 et 250 *hPa* et pour les mois d'août et d'octobre 2002, un meilleur accord est obtenu entre les résultats du modèle et les données en utilisant les émissions issues du modèle 3BEM. Dans leur conclusion, Longo *et al.* (2007) mettent en avant la nécessité d'une bonne résolution temporelle des émissions pour les études faites soit à l'échelle locale ou régionale, soit sur des événements de transport à grande échelle particulièrement intenses et isolés, résolution qu'apporte l'approche choisie dans le modèle d'émission 3BEM.

Pour compléter les travaux de Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) qui ont étudié la répartition du monoxyde de carbone dans les basses couches en saison sèche, nous nous intéressons à la saison humide et aux altitudes allant jusqu'à la haute troposphère (jusqu'à 13 *km* environ, altitude maximale atteinte au cours des vols du Falcon effectués lors de la campagne de mesures TROCCINOX). En effet, en période humide, la convection est très active, contrairement à la saison sèche, et permet un transport important des émissions de surface dans la haute troposphère. Ceci explique également la différence entre les altitudes typiques choisies pour les mesures aéroportées : en saison sèche les émissions restent confinées aux basses couches du fait de la très faible activité convective, justifiant ainsi des mesures à basse altitude, tandis qu'en saison humide les émissions sont emportées jusque dans la haute troposphère par la convection, justifiant des mesures à de plus hautes altitudes. La simulation de référence que nous avons réalisée inclut l'ensemble des processus

dynamiques (en particulier les convections profonde et restreinte et l'effet « plume-rise »), utilise les cadastres d'émissions les plus précis (celui de RETRO revu pour les grandes villes d'Amérique du Sud dans le cadre de travaux réalisés au CPTEC, projet SAEMC (South American Emissions, Megacities and Climate) et les émissions issues du modèle 3BEM pour les feux de biomasse) et prend en compte un temps de vie du monoxyde de carbone qui est fonction de la pression et de la température et qui est de deux mois en moyenne. Cette simulation de référence utilise donc la configuration la plus réaliste possible.

Des tests de sensibilité ont également été réalisés afin de vérifier l'impact des hypothèses faites ou des incertitudes des données utilisées dans la simulation sur les résultats obtenus. En effet, nous introduisons dans le modèle un champ d'initialisation de monoxyde de carbone, des données sur les émissions (cadastres et cycles hebdomadaires et/ou journaliers) et un temps de vie pour le traceur CO qui comportent une incertitude dont l'impact sur les résultats de la simulation doit être analysé.

Afin d'étudier l'impact de la convection sur la distribution de la concentration de monoxyde de carbone, des tests sans transport convectif pour les traceurs sont réalisés. Pour chaque test, l'un des transports convectifs paramétrisés (convection profonde, convection peu profonde et effet « plume-rise ») est omis, permettant ainsi par différence avec la simulation de référence d'analyser son rôle. Mes contributions concernent d'une part l'analyse des résultats et leur interprétation, et leur obtention d'autre part, en particulier le traitement statistique des données et des sorties des simulations.

## IV.2 Caractéristiques générales des simulations

Cette étude ayant en particulier pour objectif de compléter l'évaluation du CATT-BRAMS réalisée en période sèche par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007), nous avons utilisé la configuration opérationnelle du CATT-BRAMS à l'exception de la localisation des grilles horizontales et leurs résolutions horizontales. Les trois grilles du CATT-BRAMS à 150, 30 et 15 km de résolution horizontale ont été remplacées par deux grilles de 50 et 12.5 km de résolution horizontale, qui restent très proches des résolutions opérationnelles. Ces grilles ont été positionnées de manière à permettre une comparaison optimale avec les mesures de validation choisies. La configuration opérationnelle du modèle utilise en initialisation et pour forçage aux limites les analyses du CPTEC qui culminent dans la basse stratosphère. Le sommet du CATT-BRAMS est donc limitée à 20 km environ. Pour évaluer les résultats du CATT-BRAMS pour le CO, nous avons choisi d'utiliser les données aéroportées du Falcon recueillies pendant la campagne TROCCINOX de février et mars 2004, les mesures du Geophysica n'étant ni disponibles pour cette période, ni utilisables dans la configuration de grilles puisque l'altitude de croisière du Geophysica est proche de la couche d'amortissement du modèle. La campagne de 2004 a également été choisie parce qu'elle était plus étalée dans le temps que la campagne de 2005 avec plus de vols permettant d'avoir un plus large jeu de données de comparaison. Nous donnons ici les caractéristiques communes à toutes les simulations que nous avons effectuées à l'aide du modèle CATT-BRAMS. Ces caractéristiques sont la période simulée, les résolutions spatiales et temporelles, les champs météorologiques utilisés pour l'initialisation et le forçage aux limites du modèle ainsi que les paramétrisations utilisées.

### IV.2.1 Période simulée

Nous avons choisi le mois de février 2004 et la première moitié du mois de mars au coeur de la saison convective au Brésil. Au cours de cette période, plusieurs systèmes convectifs ont pu être observés lors des campagnes TROCCINOX, TROCCIBRAS et HIBISCUS. La simulation s'étend du 1<sup>er</sup> février au 15 mars 2004 et comprend une période de spinup s'étendant du 1<sup>er</sup> au 10 février.

### IV.2.2 Résolutions spatiale et temporelle

Pour les simulations, nous utilisons deux grilles imbriquées dont les champs de topographie sont montrés sur la figure IV.2.1. Ces grilles ont les mêmes niveaux verticaux, au nombre de 35. Ceux-ci s'étendent du sol jusqu'à 21 km d'altitude, la couche d'amortissement s'étendant de 15 km jusqu'au sommet du domaine. L'épaisseur de la première couche est de 150 m et l'épaisseur maximale fixée pour une couche est de 900 m, atteinte à partir d'environ 9 km d'altitude. Ces niveaux correspondent à la configuration opérationnelle du modèle utilisée au CPTEC. Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) utilisent des niveaux verticaux légèrement différents afin de mieux détailler les basses couches de l'atmosphère.

La grille 1 couvre la majeure partie de l'Amérique du Sud, nous permettant ainsi de prendre en compte l'ensemble des émissions au-dessus de ce continent. Elle s'étend en latitude de  $-35$  à  $12^{\circ}\text{N}$  et en longitude de  $-86$  à  $-24^{\circ}\text{E}$ , avec une résolution en x (suivant la longitude) et en y (suivant la latitude) de 50 km. Le champ de topographie utilisé sur cette grille est montré sur la figure IV.2.1 (a). Le relief y est prononcé du fait de la présence des Andes, visibles sur la côte ouest de l'Amérique du Sud. Le pas de temps sur cette grille est de 60 s.

La grille 2 a été choisie de manière à couvrir le domaine parcouru par le Falcon lors de la campagne TROCCINOX 2004. Elle s'étend de  $-29$  à  $-11^{\circ}\text{N}$  en latitude et de  $-54$  à  $-37^{\circ}\text{E}$  en longitude, avec une résolution en x et en y de 12.5 km. La topographie utilisée sur cette grille est montrée sur la figure IV.2.1 (b). Le relief y est moins prononcé que sur la grille 1 puisque les Andes n'y sont pas présentes, mais reste cependant important puisque des sommets culminant à plus de 1200 m d'altitude sont présents. Le pas de temps sur cette grille est de 20 s. Sur la grille 2, comme sur la grille 1, l'archivage des sorties du modèle est fait à une fréquence horaire.

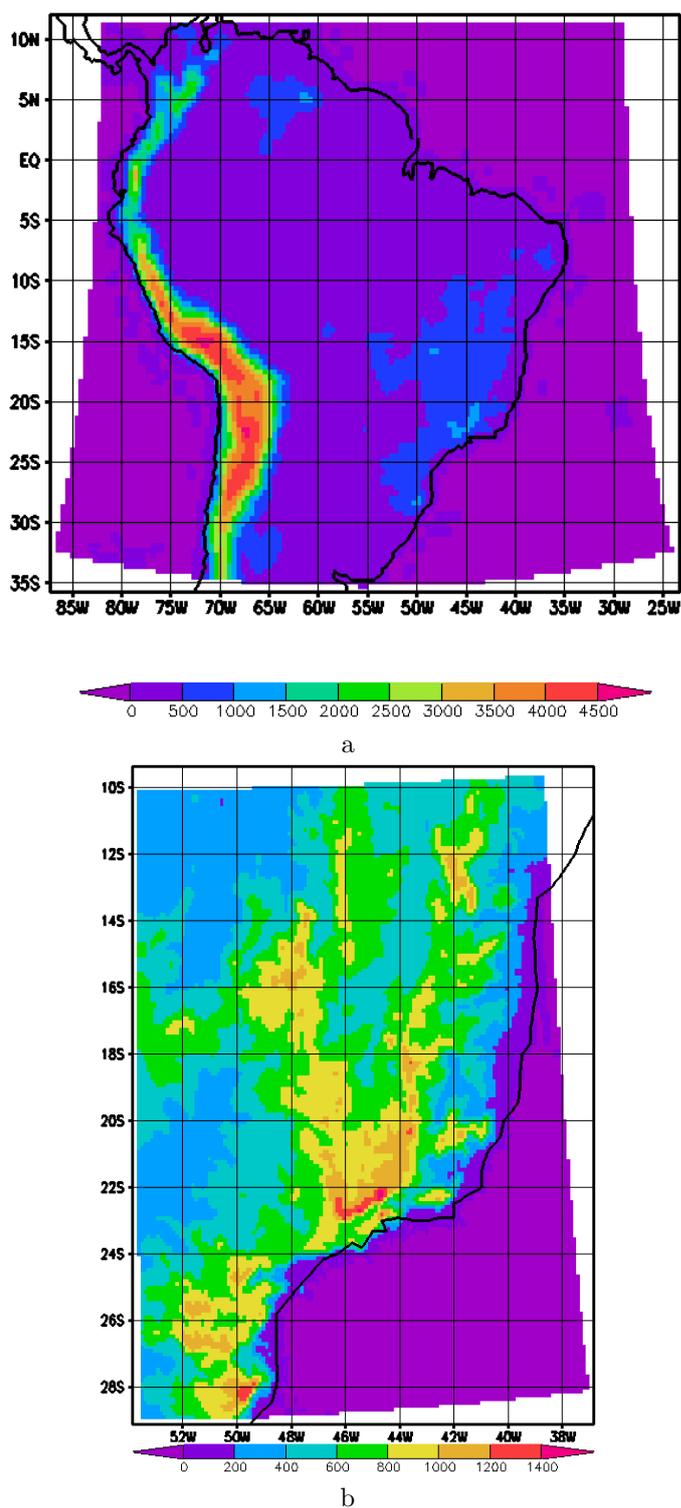


FIG. IV.2.1 – Champ de topographie (en mètres) utilisé sur la grille 1 (a) et sur la grille 2 (b) lors de la simulation. La grille 2 est imbriquée dans la grille 1.

### IV.2.3 Initialisation des champs météorologiques et forçage

Les champs de grande échelle utilisés pour la simulation de référence et pour les tests de sensibilité proviennent du modèle global du CPTEC utilisé en configuration T126L28 (102 km de

résolution horizontale à l'équateur et 28 niveaux verticaux). A ces sorties du modèle global sont assimilées dans le CATT-BRAMS les données accessibles opérationnellement (radio-sondages, mesures de stations de surface par exemple) par la méthode 4DDA. Les analyses ainsi obtenues sont utilisées pour l'initialisation des champs météorologiques (pression, température, humidité spécifique et vent horizontal) ainsi que pour le forçage aux bords du domaine au cours de la simulation et sont similaires à celles utilisées par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007).

#### IV.2.4 Paramétrisations utilisées

La paramétrisation radiative utilisée est CARMA. Comme expliqué dans la partie II.2.3.2, elle permet la prise en compte de l'impact des aérosols sur le bilan radiatif. Dans le modèle, les aérosols sont émis uniquement par les feux de biomasse. Bien que ces derniers soient nettement moins nombreux en saison humide qu'en saison sèche, leur nombre ainsi que la quantité d'aérosols émis ne sont pas pour autant négligeables.

Pour la paramétrisation de la convection, nous avons utilisé le schéma de Grell & Dévényi (2002) pour la convection profonde et le schéma de Grell *et al.* (1994) pour la convection restreinte. Dans ces schémas, le diamètre maximum d'un nuage est d'environ 10 km. Ce diamètre maximum reste inférieur à la résolution des deux grilles du modèle. Ces schémas sont donc compatibles avec les résolutions utilisées.

Comme cela a été vu, le schéma de Grell & Dévényi (2002) pour la convection profonde laisse le choix entre plusieurs fermetures : AS (Arakawa-Schubert), SC (de type Fritsch-Chappel ou Kain-Fritsch), GR (Grell), LO (« Low level Omega »), MC (« Moisture Convergence ») et « ensemble » qui détermine statistiquement la redistribution la plus probable de chaleur, d'humidité et des masses d'air à partir des résultats fournis par les autres fermetures. Celle que nous avons utilisée est MC, puisque c'est elle qui a donné les meilleurs résultats sur les taux précipitants par rapport aux observations de TRMM et de GPCP montrées sur la figure IV.2.2. Les résultats de ces tests sont illustrés sur les figures IV.2.3 pour AS et SC, IV.2.4 pour EN et GR et IV.2.5 pour LO et MC. Pour ces tests, nous avons simulé 15 jours du 1<sup>er</sup> au 15 février avec une seule grille en utilisant chacune des fermetures disponibles.

Avec les fermetures AS et SC, on constate la présence d'artéfacts dans les coins nord-est et nord-ouest du domaine. La position de ces artéfacts en bord de grille et le long de l'ITCZ (bande de précipitation le long de l'équateur météorologique) suggère un défaut dans la gestion par le modèle de l'intersection entre le bord du domaine et l'ITCZ. La fermeture « ensemble » combinant statistiquement les résultats des autres fermetures, on retrouve dans les précipitations simulées des défauts similaires à celles obtenues avec les fermetures AS et SC. La fermeture GR donne des résultats cohérents avec les observations. Les précipitations sont plus faibles dans l'ensemble par rapport aux autres fermetures et les principales structures sont reproduites. Les précipitations obtenues avec la fermeture LO sont les plus faibles. On peut noter une sensibilité au relief des Andes plus grande avec les fermetures LO et MC. Les précipitations obtenues avec cette dernière sont plus importantes et les branches majeures de précipitations sont plus marquées que dans les autres fermetures. Pour ces deux fermetures, les précipitations au-dessus du bassin amazonien sont moins

marquées qu'avec la fermeture GR.

Dans cette étude, c'est la fermeture MC qui a été choisie car elle donne le meilleur accord avec les données de TRMM et de GPCP. En effet, les précipitations sont plus importantes au milieu des terres et la bande de précipitations liée à la SACZ (orientée nord-ouest - sud-est entre l'équateur et -35°N environ) est mieux reproduite. Ce dernier point est le plus important pour cette étude car c'est le long de cette zone de convergence que les comparaisons sont faites sur la grille 2. Il est à noter que ce n'est pas la fermeture utilisée opérationnellement au CPTEC (Freitas *et al.* 2007 et Longo *et al.* 2007) qui est la fermeture « ensemble ».

Dans la version opérationnelle du modèle, la diffusion pour les traceurs est significativement plus faible que pour les autres scalaires afin d'éviter un lissage trop important des champs de traceurs. Pour les simulations présentées dans ce chapitre, la même diffusion a été appliquée à tous les scalaires, la réduction de la diffusion pour les traceurs menant à des oscillations numériques irréalistes.

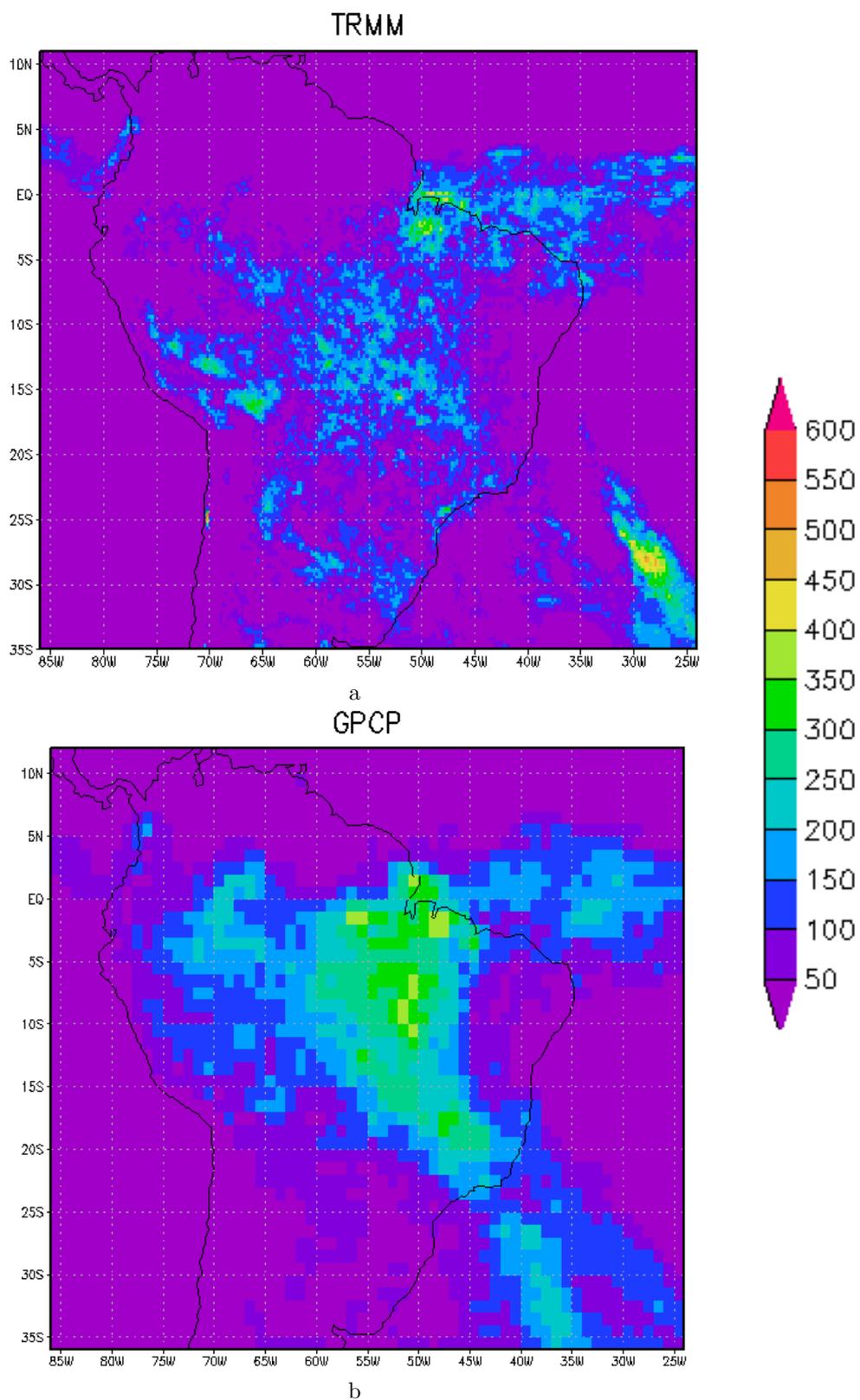


FIG. IV.2.2 – Précipitations accumulées à la surface (en mm) entre le 1<sup>er</sup> et le 15 février estimées à partir des observations de TRMM (a) et de GPCP (b). La résolution des données de TRMM est de 0.25° et de 3 heures. Les données de GPCP ont une résolution d'environ 100 km et d'une journée.

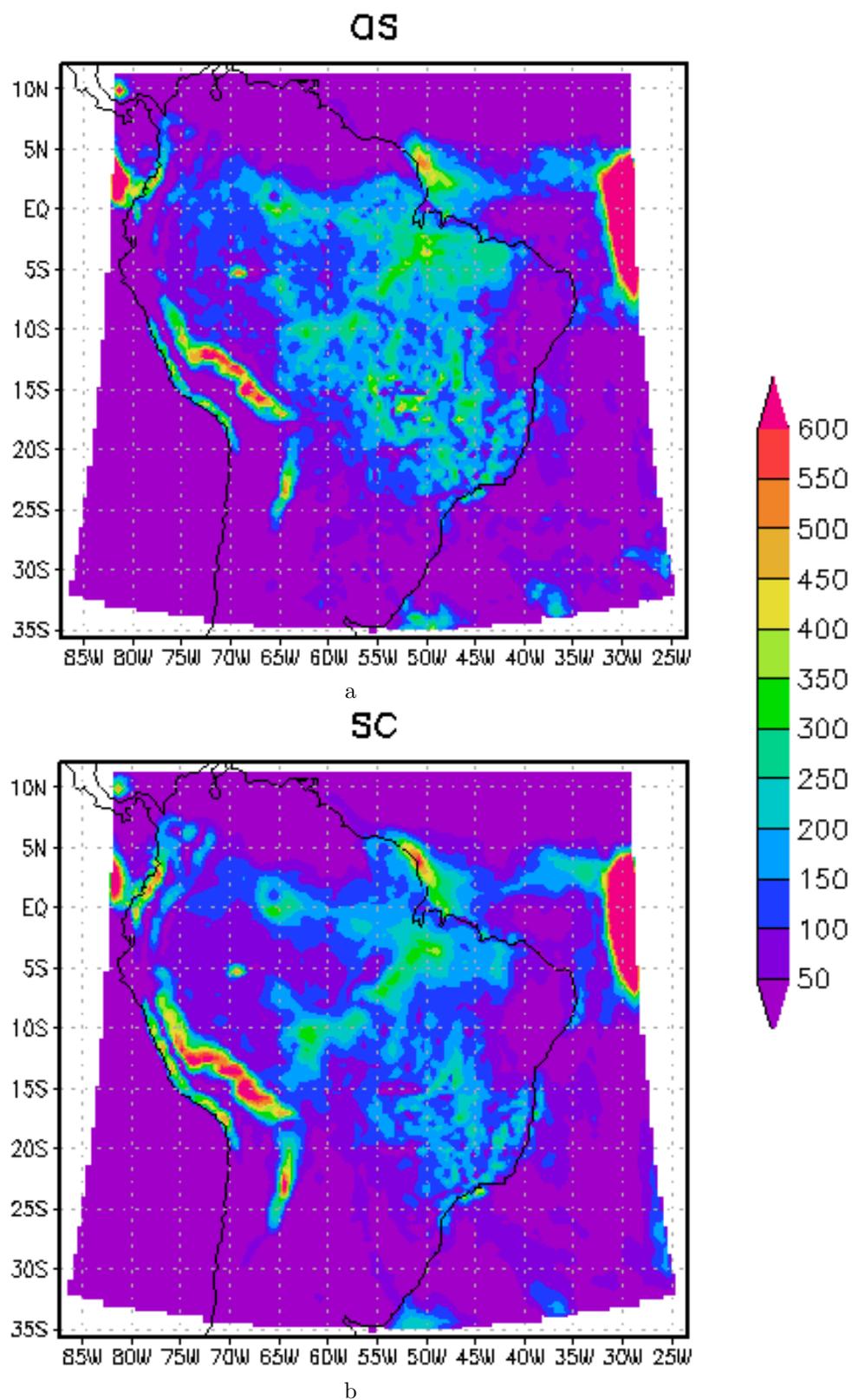


FIG. IV.2.3 – Précipitations accumulées à la surface (mm) entre le 1<sup>er</sup> et le 15 février pour les fermetures AS (a) et SC (b). Les précipitations sont accumulées sur la même période que pour la figure IV.2.2.

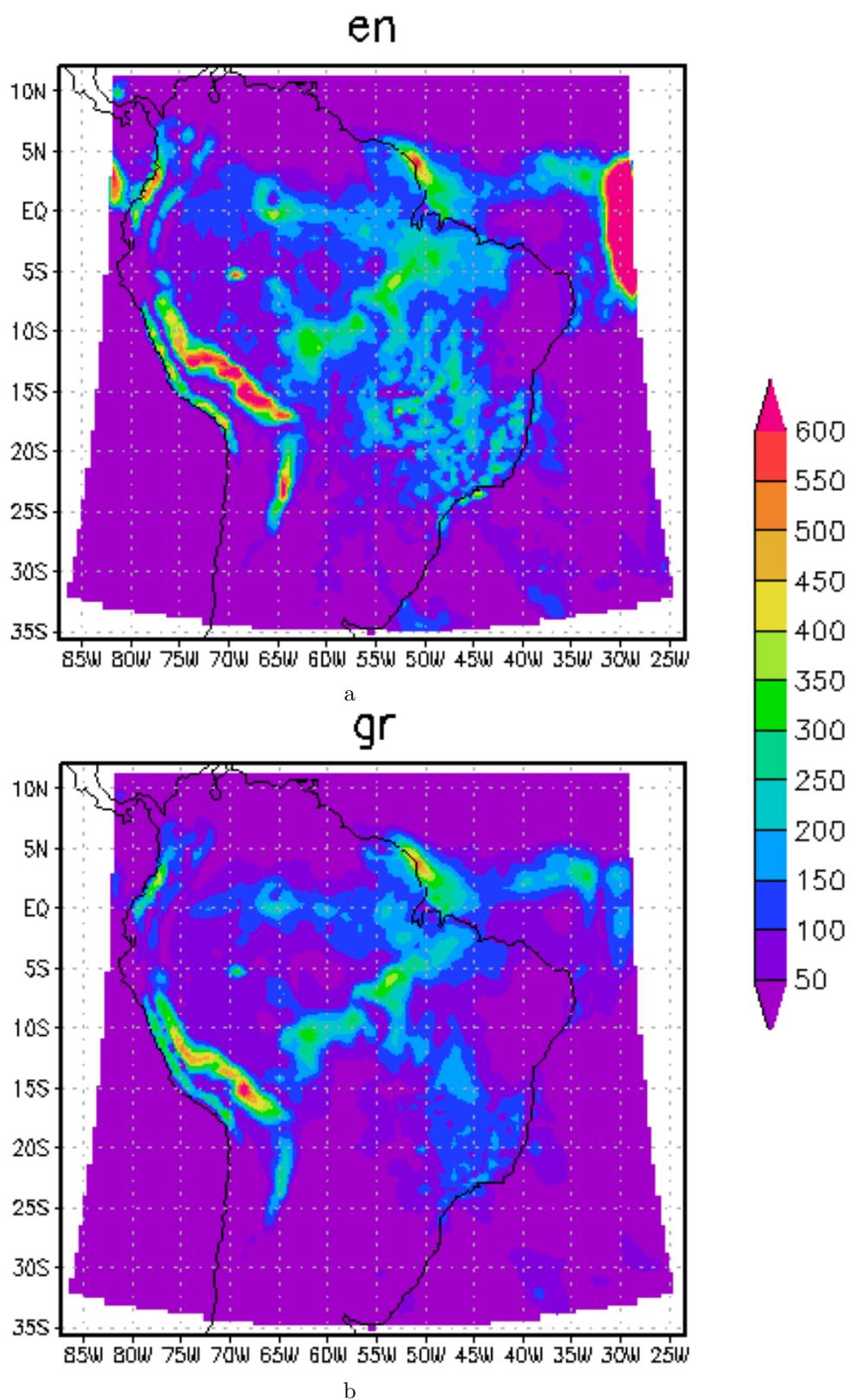


FIG. IV.2.4 – Figure similaire à la figure IV.2.3 pour les fermetures « ensemble » (a) et GR (b).

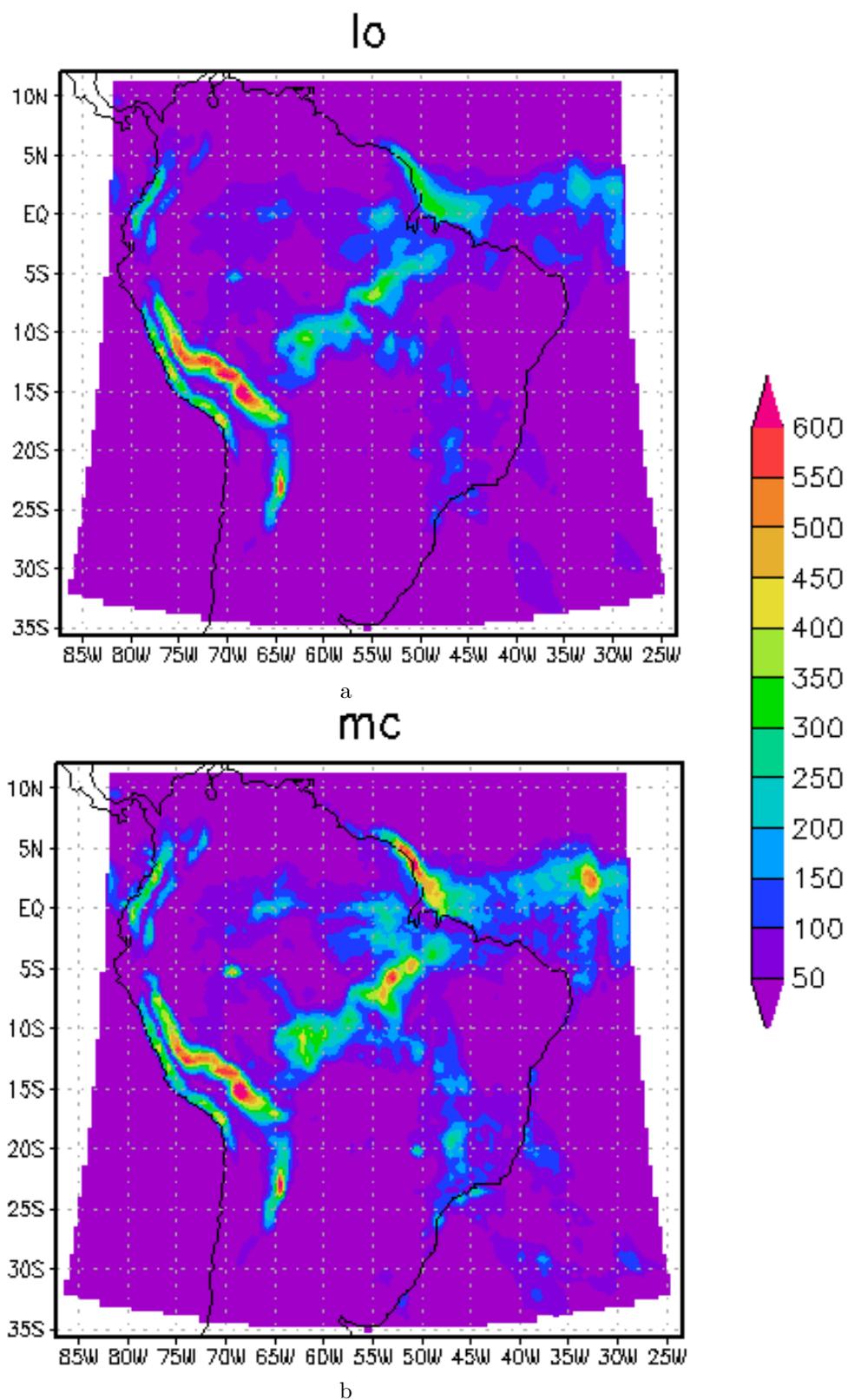


FIG. IV.2.5 – Figure similaire à la figure IV.2.3 pour les fermetures LO (a) et MC (b).

## IV.3 Description et analyse des résultats de la simulation de référence

### IV.3.1 Description

#### IV.3.1.1 Initialisation du traceur CO

L'initialisation du traceur CO est de première importance. C'est elle qui détermine la quantité de CO placée dans la grille, ainsi que la valeur de fond au-dessus de laquelle la concentration de CO varie. La méthode utilisée par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) consiste à initialiser à zéro les champs de CO, puis à créer un champ initial à l'aide d'une période de spinup de 15 jours, au cours de laquelle les sources libèrent le monoxyde de carbone dans la grille, le CO émis suivant ensuite les champs dynamiques (diffusion, advection, convection). Le champ initial ainsi obtenu est le champ des augmentations locales ou régionales de la concentration de monoxyde de carbone, la valeur de fond de la concentration de CO étant ajoutée au cours du post-traitement. Cette valeur est supposée constante sur le domaine horizontalement et verticalement. Cette hypothèse se justifie de la manière suivante. Ils s'intéressent essentiellement à la saison sèche et à la basse troposphère. La concentration de monoxyde de carbone durant cette saison étant principalement dominée par les feux de biomasse, l'ajout d'une concentration de fond constante lors du post-traitement semble raisonnable dans la basse et moyenne troposphère.

Les différences entre les deux saisons sont visibles sur la figure IV.3.1 ainsi que sur les figures IV.3.2 et IV.3.3 issues des données de MOPITT pour les mois correspondants. Pour août 2002, la concentration moyenne de CO à 850 et 500 *hPa* est plus importante en moyenne dans l'hémisphère nord que dans l'hémisphère sud et est dominée dans l'hémisphère sud par les feux de biomasse comme le montre la forte augmentation de la concentration de monoxyde de carbone au-dessus de l'Amérique du Sud et de l'Afrique. Jusqu'à 250 *hPa* inclus (figures non montrées), la concentration est comprise entre 60 et 80 *ppbv* en-dehors de la zone affectée par des feux de biomasse (figure IV.3.1). Les champs de monoxyde de carbone pour les mois de septembre et d'octobre 2002 ne sont pas montrés ici, mais ils donnent des indications similaires à août 2002, avec simplement une augmentation de la concentration en monoxyde de carbone au-dessus de l'Amérique du sud et de l'Afrique sur chacun des niveaux de pression de MOPITT. La valeur de fond de la concentration de monoxyde de carbone peut donc être considérée constante au-dessus de l'Amérique du Sud jusqu'à 250 *hPa* inclus pour ces trois mois. L'emploi d'une valeur de fond constante prise entre 60 et 80 *ppbv* est donc justifiée. Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) ont utilisé une valeur de fond de 60 *ppbv* appliquée a posteriori.

En février 2004, la différence entre l'hémisphère nord et l'hémisphère sud est très marquée dans les basses couches. La concentration de CO dans l'hémisphère sud est faible, laissant apparaître un gradient méridien de concentration orienté nord-sud au-dessus de l'Amérique du Sud visible sur tous les niveaux de pression de MOPITT. Au mois de mars 2004, le gradient méridien de concentration de CO au-dessus de l'Amérique du Sud est similaire à celui observé en février 2004. En saison humide, la concentration de fond de monoxyde de carbone est dominée par la répartition à grande échelle de ce gaz.

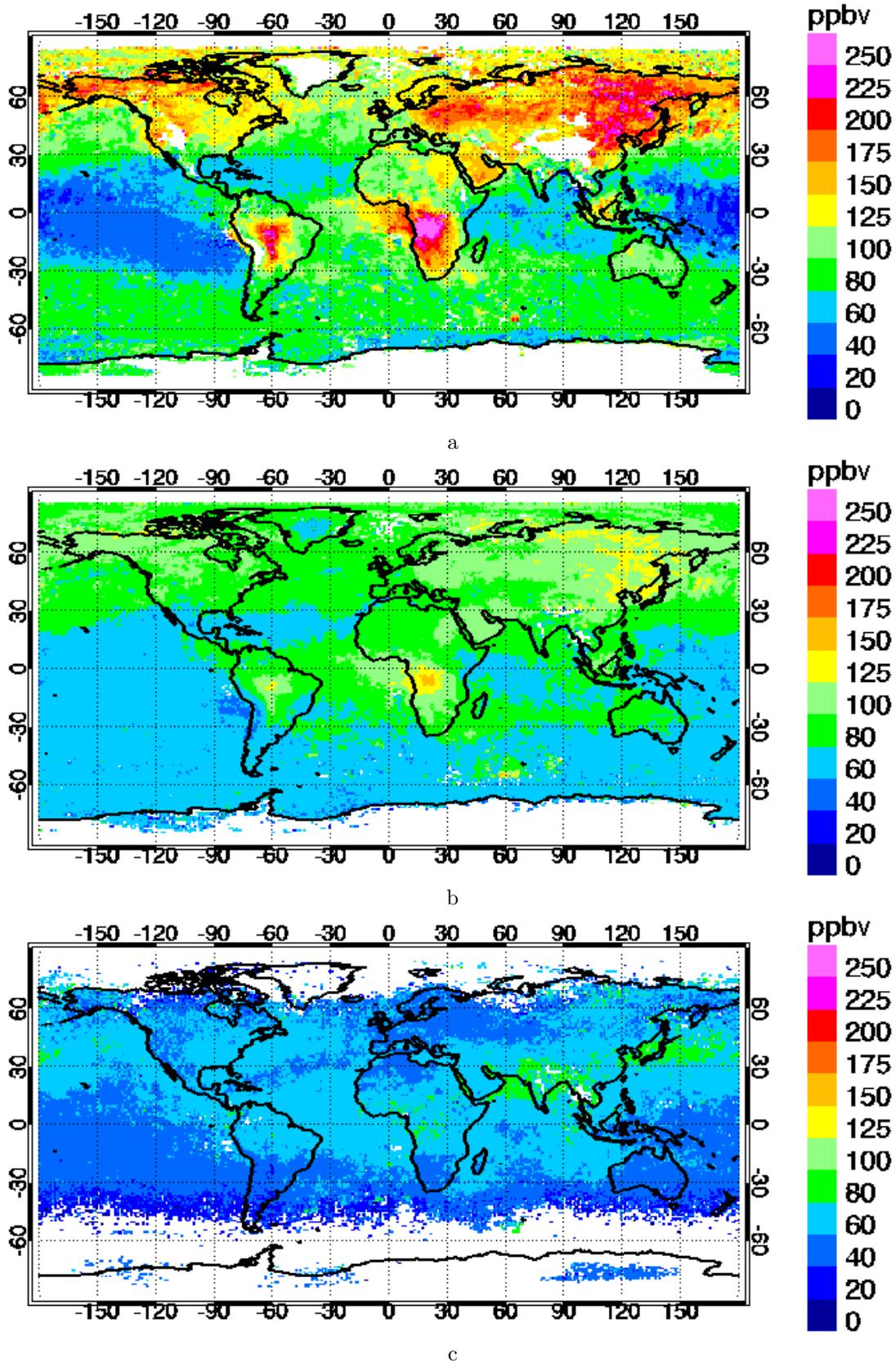


FIG. IV.3.1 – Moyennes mensuelles de la concentration de CO d'août 2002 à 850 (a), 500 (b) et 150 hPa (c) obtenues à partir des données de MOPITT.

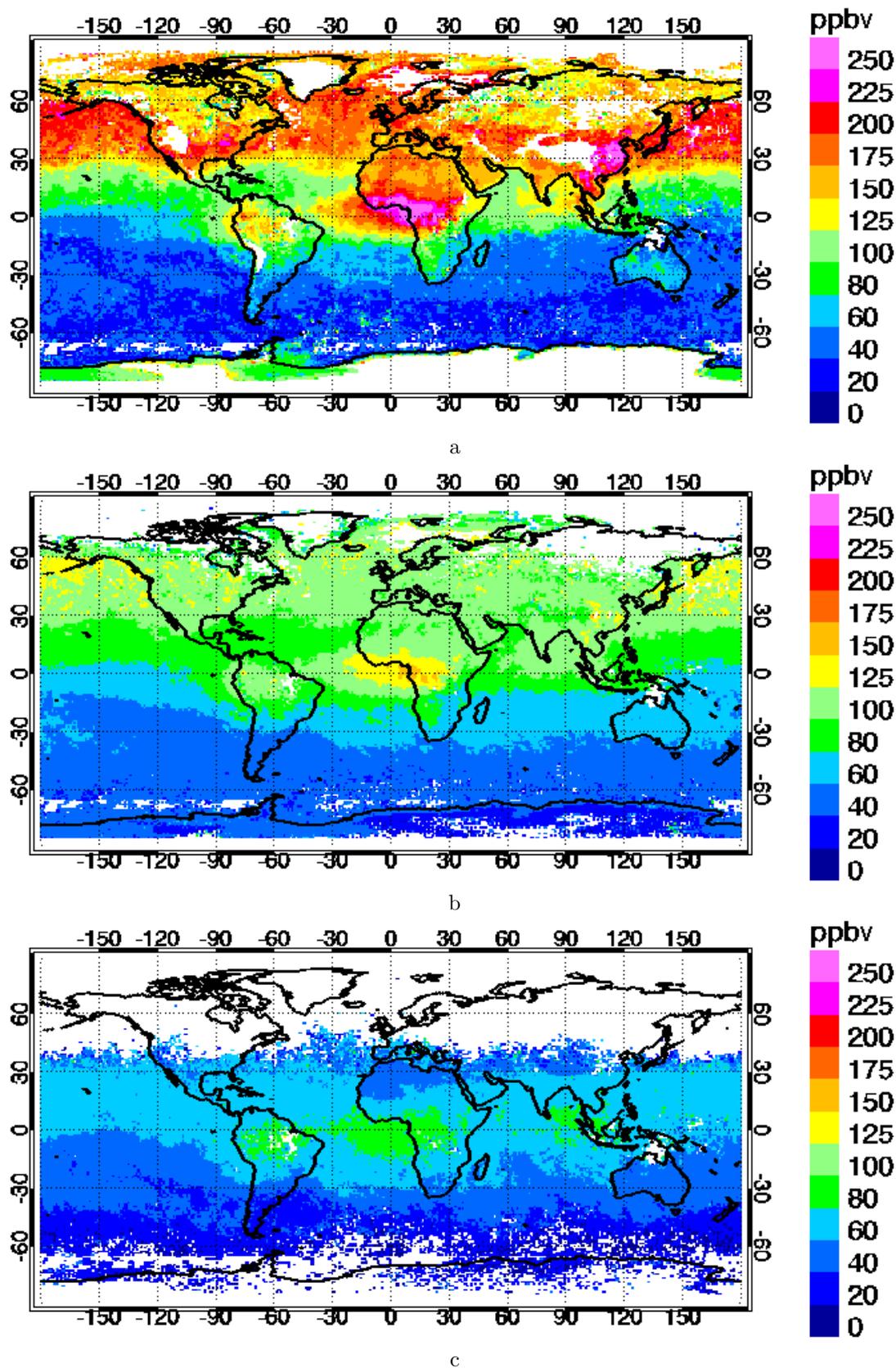


FIG. IV.3.2 – Moyennes mensuelles de la concentration de CO de février 2004 pour les niveaux de pression 850 hPa (a), 500 hPa (b) et 150 hPa (c) obtenues à partir des données de MOPITT.

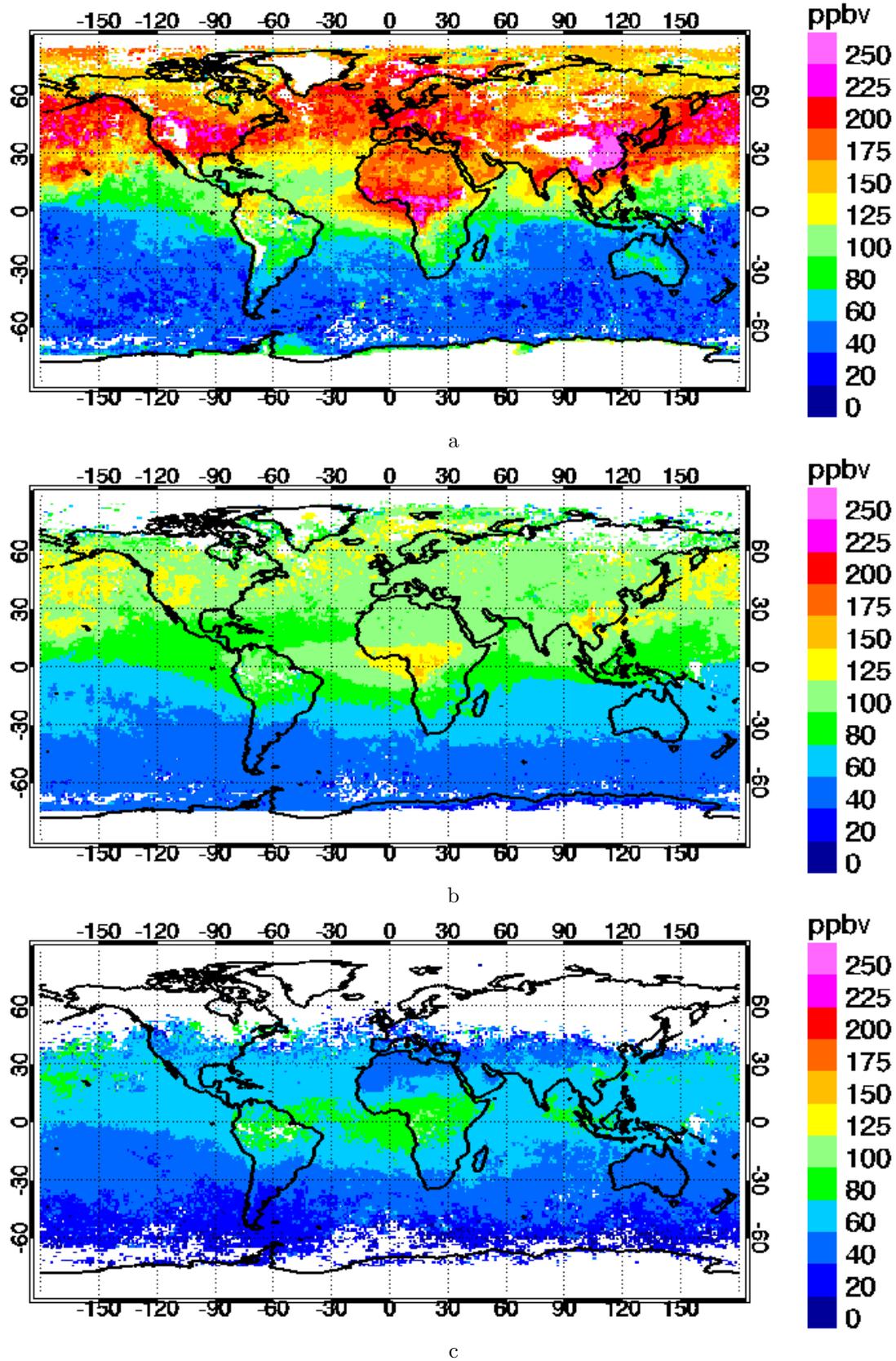


FIG. IV.3.3 – Moyennes mensuelles de la concentration de CO de mars 2004 pour les niveaux de pression 850 hPa (a), 500 hPa (b) et 150 hPa (c) obtenues à partir des données de MOPITT.

Il est nécessaire dans ces conditions d'utiliser une initialisation non nulle des champs de CO. Pour cela, nous avons utilisé les données de l'instrument MOPITT à bord du satellite TERRA de la NASA. Les données mensuelles pour les mois de février et mars 2004 (couvrant la période simulée) concernant l'Amérique du Sud ont été moyennées zonalement sur chacun des sept niveaux de pression de MOPITT afin de conserver une variation méridienne et suivant l'altitude de la concentration en monoxyde de carbone. L'initialisation obtenue est donc un champ de CO dont les concentrations sont réalistes mais dont la distribution spatiale est idéalisée (moyenne zonale), l'objectif étant d'introduire une valeur de fond réaliste de la concentration de CO. Pour chacun des sept niveaux de pression de MOPITT, j'ai utilisé une interpolation polynomiale afin de décrire de manière continue cette distribution idéalisée sur le domaine spatial couvert par la simulation. Ce champ de CO est ensuite interpolé horizontalement et verticalement sur la grille du modèle, ce qui permet de prendre en compte comme valeur de fond au démarrage de la simulation le gradient méridien moyen et les variations verticales moyennes de CO que l'on peut observer dans les données de MOPITT. La figure IV.3.4 montre les valeurs de CO ainsi obtenues et qui ont été utilisées pour notre simulation. Les conditions aux limites utilisées (gradient nul pour les flux entrants et sortants) permettent au profil initialement introduit d'avoir un impact tout au long de la simulation. Ces conditions aux limites se comportent de la manière suivante :

- en cas de flux sortant, le CO sort suivant le vent, actualisant ainsi les concentrations en bord de grille,
- en cas de flux entrant, c'est la concentration en bord de grille qui est introduite.

Il a également été nécessaire de compléter les profils extraits des données moyennées de MOPITT. En effet, le dernier niveau de pression de MOPITT est situé à 150 hPa. Or, le dernier niveau de la grille du modèle est situé aux environs de 50 hPa. Nous avons donc introduit entre 150 et 50 hPa une décroissance exponentielle de la concentration de CO dans le modèle afin de compléter l'initialisation. Cette décroissance est telle que la concentration de CO à 20 km est d'environ 20 ppbv (Flocke *et al.*, 1999).

Les dix premiers jours de la simulation constituent la période de spinup. Celle-ci est nécessaire à l'obtention d'un champ de CO initial réaliste car les valeurs initialement fournies au modèle sont zonalement constantes en niveaux de pression et sont donc décorréélées des structures météorologiques. La période de spin-up permet de redistribuer à l'intérieur du domaine le CO initialement introduit suivant les structures météorologiques. Pour cette période, seule la grille 1 est utilisée.

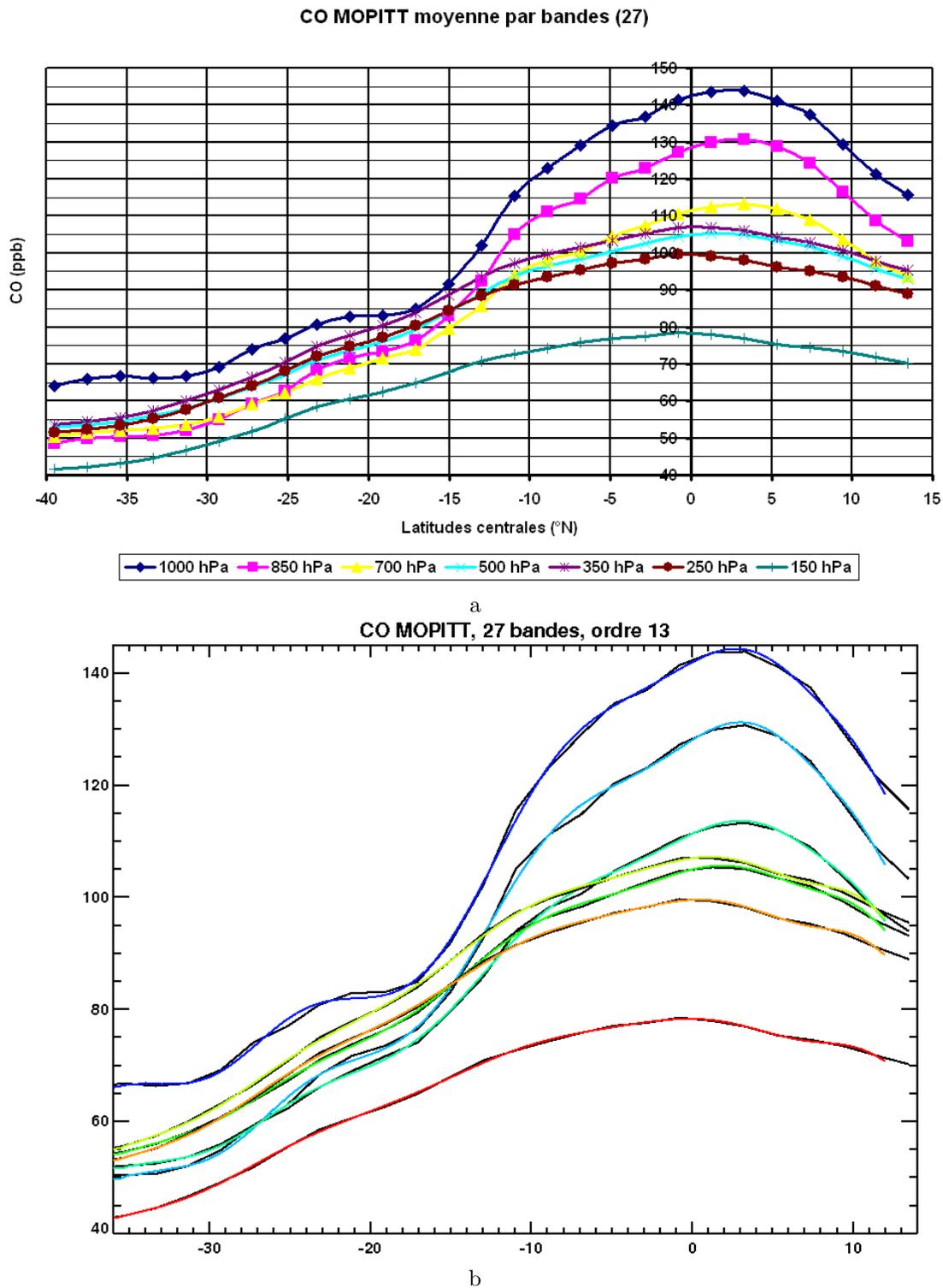


FIG. IV.3.4 – Moyennes zonales par bandes de latitude pour chaque niveau de pression de MOPITT (a) et interpolations (b) faites à partir de ces valeurs.

#### IV.3.1.2 Émissions utilisées

Les émissions sont très importantes dans la mesure où elles sont les sources de CO dans la grille du modèle. Elles doivent donc être les plus réalistes possible. Nous avons utilisé les émissions

anthropiques données par la base de donnée RETRO avec les corrections pour les grandes villes d'Amérique du Sud calculées par M. Alonso, doctorant au CPTEC. Les cadastres étant faits pour l'année 2000, les corrections consistent en une mise à jour pour l'année 2004 faite à partir d'équations obtenues en corrélant le CO émis et les données démographiques sur les sources (Alonso *et al.*, 2008). Leur résolution spatiale est de  $0.5^\circ$  et leur résolution temporelle mensuelle.

Pour les émissions dues aux feux de biomasse, nous utilisons les émissions basées sur la localisation des feux par satellite générées par le modèle 3BEM implémenté au CPTEC. La résolution spatiale est adaptée à la grille du modèle et la résolution temporelle est journalière. Ceci permet de décrire plus finement les émissions dues aux feux de biomasse au sein de la grille 2 par rapport à la grille 1.

Le monoxyde de carbone a également une origine naturelle prise en compte dans le modèle CATT-BRAMS par l'intermédiaire de cadastres de pseudo-émissions naturelles disponibles dans la base de données POET. Ces cadastres ont une résolution spatiale de  $0.5^\circ$  et une résolution temporelle mensuelle. Le monoxyde de carbone « naturel » provient de la dégradation de composés organiques volatiles (COV). Le modèle CATT-BRAMS ne prenant pas en compte la chimie, l'utilisation de ces cadastres est nécessaire en saison humide puisque la fréquence des feux de biomasse est faible, impliquant une baisse de la contribution relative des feux biomasse au monoxyde de carbone émis par rapport à la contribution relative de la dégradation des COV au monoxyde de carbone total. Pour notre simulation, les émissions pseudo-naturelles contribuent sur la grille 1 à hauteur de 39% des émissions totales sur la simulation, les émissions de feux de biomasse à hauteur de 37% et les émissions anthropiques à hauteur de 24%. Il est à noter que dans le nouveau modèle avec chimie C-CATT-BRAMS la dégradation des COV est prise en compte. Les cumuls des émissions utilisées au cours de la simulation sont affichées sur les figures IV.3.5 (anthropiques), IV.3.6 (feux de biomasse) et IV.3.7 (pseudo-naturelles).

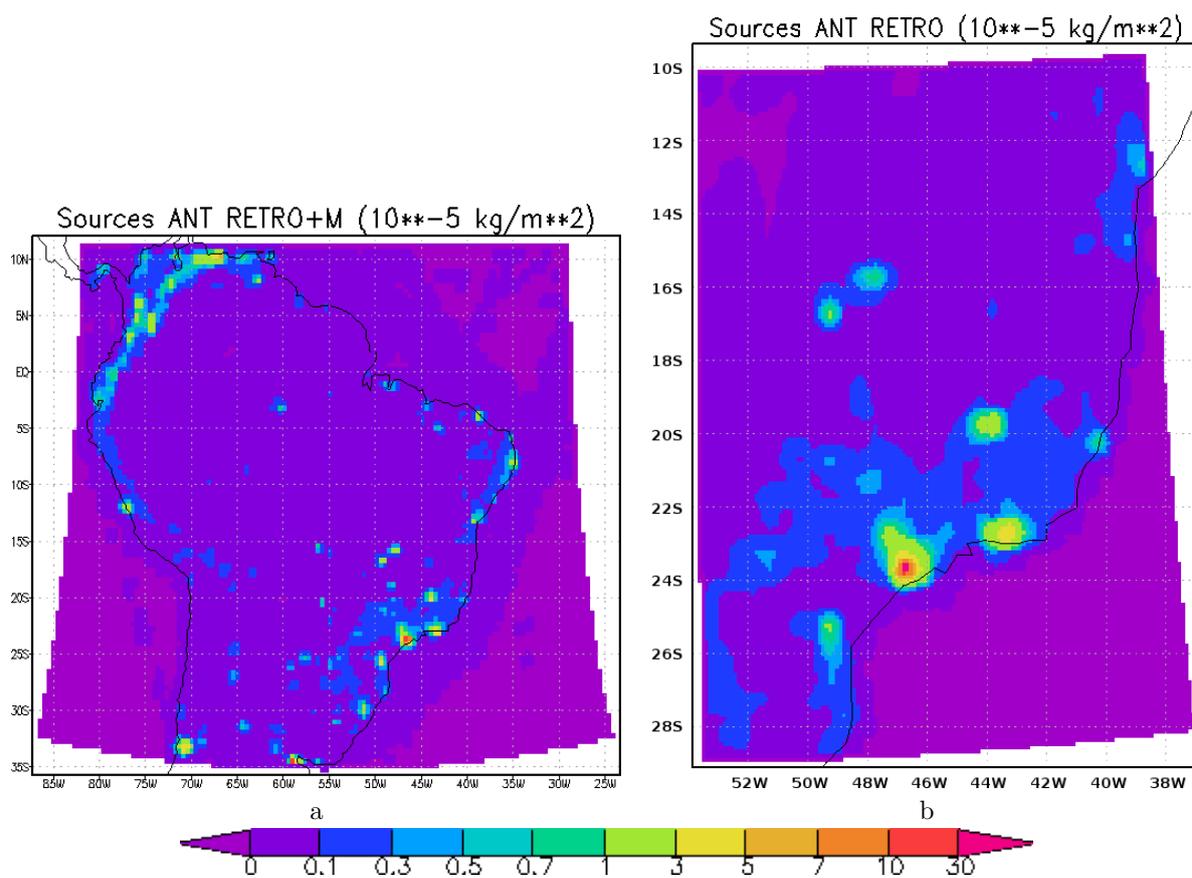


FIG. IV.3.5 – Champs des émissions anthropiques accumulées sur la grille 1 (a) et sur la grille 2 (b) pour la simulation de référence (en  $10^{-5}$  kg/m<sup>2</sup>).

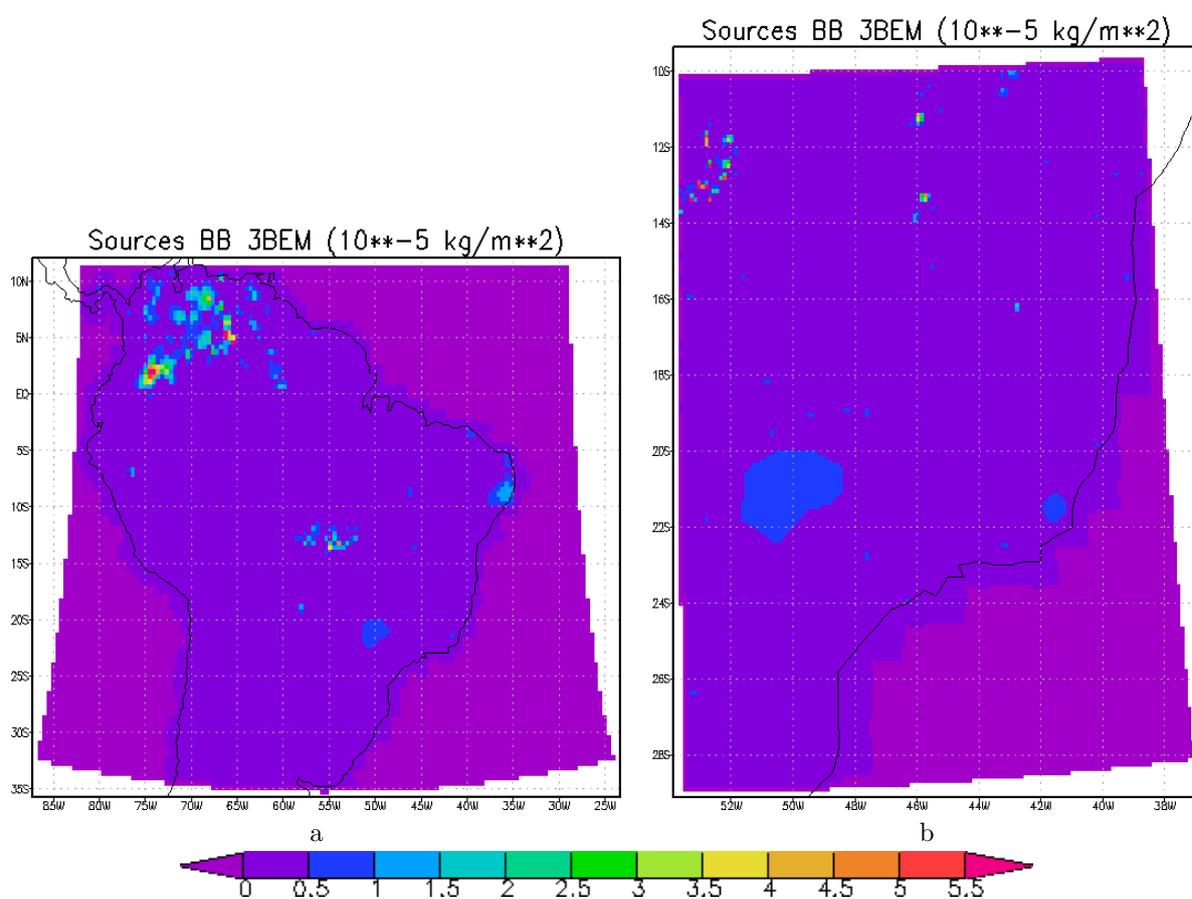


FIG. IV.3.6 – Champs des émissions de feux de biomasse accumulées sur la grille 1 (a) et sur la grille 2 (b) pour la simulation de référence (en  $10^{-5} \text{ kg/m}^2$ ).

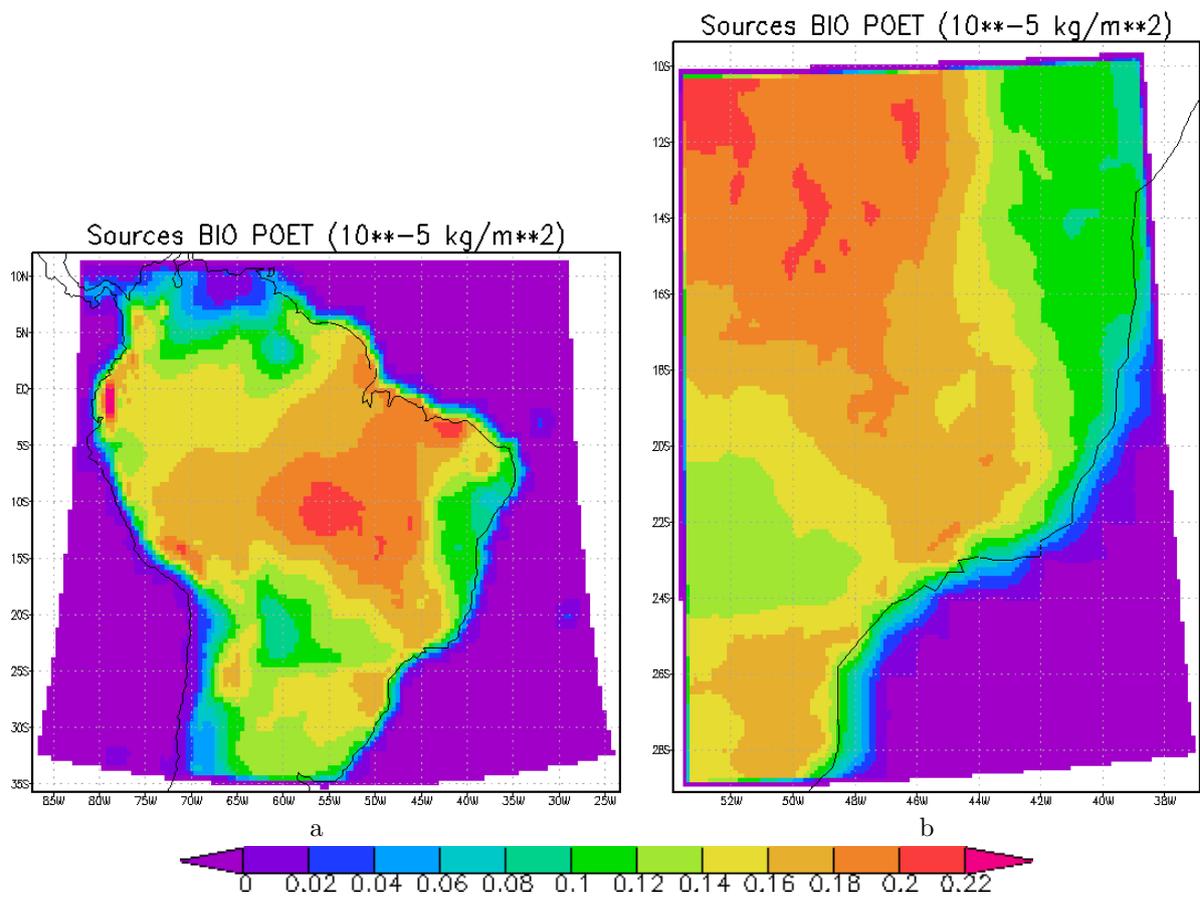


FIG. IV.3.7 – Champs des émissions pseudo-naturelles accumulées sur la grille 1 (a) et sur la grille 2 (b) pour la simulation de référence (en  $10^{-5} \text{ kg/m}^2$ ).

### IV.3.1.3 Temps de vie du traceur CO

Le principal puits du monoxyde de carbone est sa réaction avec le radical OH. Puisque le modèle CATT-BRAMS ne contient pas de module de chimie, ce puits est pris en compte par l'introduction dans le modèle d'une durée de vie du traceur CO décrite par une fonction empirique :

$$\tau(s) = \frac{6.94 * 10^6}{1 + 0.143 * \frac{P(hPa)}{T(K)}} \quad (IV.3.1)$$

Où  $\tau$  est le temps de vie (s),  $P$  est la pression (hPa) et  $T$  la température (K). La représentation de ce temps de vie est donnée sur la figure IV.3.8. On peut voir que le CO est plus rapidement consommé dans les basses couches qu'en altitude, ce qui correspond à la variation de la constante de réaction avec les conditions thermodynamiques (pression, température). Pour cette simulation, la durée de vie moyenne est de deux mois, ce qui correspond à une concentration de  $10^6 \text{ molécules/cm}^{-3}$  du radical OH en moyenne globale sur un cycle diurne (Roelofs & Lelieveld, 2000; Spivakovsky *et al.*, 2000; Lawrence *et al.*, 2001; Prinn *et al.*, 2001; Wang *et al.*, 2001). Ce temps de vie varie d'environ 8 à 11 semaines, mais peut descendre à environ 1 mois dans les basses couches (comme dans la version opérationnelle du CATT-BRAMS) et monter à environ 3 mois dans la stratosphère. Cela correspond respectivement à une augmentation et à une baisse de la concentration en radical OH.

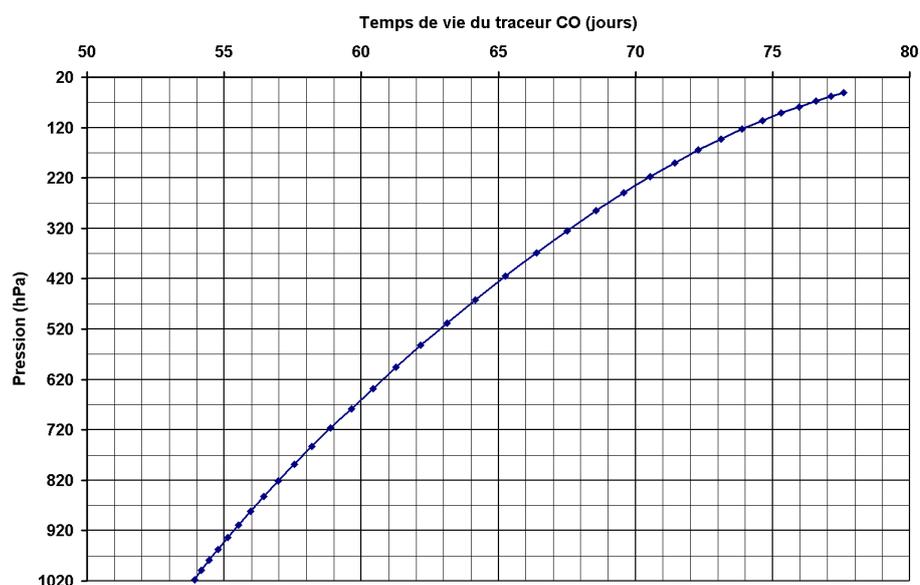


FIG. IV.3.8 – Temps de vie du traceur CO pour la simulation de référence. Les profils de pression et de température utilisés sont les profils de référence calculés par le modèle.

### IV.3.2 Analyse des résultats météorologiques

Dans un premier temps, nous comparons les résultats météorologiques de la simulation aux mesures disponibles. Ces résultats sont les mêmes pour la simulation de référence et pour les tests de sensibilité, puisque dans ceux-ci seuls les traceurs sont modifiés. L'objectif de ces comparaisons est de valider la simulation météorologique et ainsi de s'assurer de la qualité de la représentation de la dynamique dans le modèle, représentation qui détermine la répartition spatio-temporelle du

CO lors de la simulation. Nous disposons d'estimations satellitaires de précipitations, de données issues de radio-sondages réalisés dans le cadre de la campagne TROCCIBRAS et de mesures faites lors des vols du Falcon.

### IV.3.2.1 Précipitations

Nous validons les résultats pour la simulation de référence en comparant les pluies accumulées dans le modèle à celles observées. Les données des taux précipitants en surface accumulés sont disponibles pour toute la durée simulée toutes les trois heures à partir du produit 3B42 de TRMM et jour par jour à partir du produit de GPCP. La démarche choisie pour la comparaison est la suivante : la somme sur la période de la simulation est calculée pour chacune des séries de données (modèle, TRMM et GPCP), puis les données de TRMM et du modèle sont moyennées suivant la résolution spatiale des données de GPCP, qui est la plus grossière (de l'ordre du degré carré). Cette démarche permet de faire une comparaison objective entre les trois sources de données (GPCP, TRMM et le modèle).

Les résultats sont montrés sur les figures IV.3.9 et IV.3.10. Les résultats pour la grille 1 montrent que la branche de précipitations liée à l'ITCZ est reproduite par le modèle, ainsi que la branche de précipitations liée à la SACZ. Cette dernière est cependant moins marquée dans le modèle que dans les observations, même dans la zone de la grille 2 dans laquelle les précipitations accumulées augmentent légèrement du fait de l'échange d'informations entre les deux grilles. Les précipitations au-dessus du bassin amazonien sont elles aussi moins importantes par rapport aux observations. Les précipitations au-dessus des Andes sont significativement plus intenses dans le modèle que ne l'indiquent les mesures. Cependant, de par la technique de mesure utilisée, les précipitations observées sont probablement sous-évaluées dans les zones de haute montagne. Une sur-évaluation importante est également visible au nord du domaine, ainsi qu'en bord de grille au nord-est (due à un effet de bord).

Sur la grille 2, qui inclut une partie de la SACZ, la forme générale dans les observations montre une bande de précipitations partant du coin nord-ouest vers le coin sud-est, avec de part et d'autre des précipitations beaucoup plus faibles, les plus faibles étant situées dans les coins nord-est du domaine. La bande de précipitations est reproduite par le modèle avec une intensité généralement intermédiaire entre celle de TRMM et celle de GPCP. Le modèle reproduit également des précipitations plus faibles en dehors de cette bande mais un peu trop faibles dans le coin sud-ouest du domaine et un peu trop fortes dans le coin nord-est.

La figure IV.3.11 montre pour la grille 1 les précipitations accumulées fournies par le schéma microphysique du modèle et celles fournies par la paramétrisation de la convection. Il existe de fortes différences entre les deux types de précipitations. La paramétrisation microphysique représente les processus microphysiques à une échelle supérieure ou égale à la taille de la maille, tandis que la paramétrisation de la convection prend en charge les processus microphysiques à une échelle sous-maille. Cependant, les deux types de précipitations ne sont pas totalement indépendants. En comparant l'emplacement des précipitations fournies par la paramétrisation de la convection sur la grille 1 (figure IV.3.11 b), les précipitations sur la grille 2 (figure IV.3.10 c) et l'orographie (montrée sur la figure IV.2.1), on peut voir que l'orographie joue un rôle important dans le déclenchement de

la paramétrisation de la convection : les précipitations sur la grille 1 sont très fortes près des Andes et sur la grille 2 la différence de localisation des précipitations les plus faibles entre le modèle et les observations peut s'expliquer par la présence de reliefs dans le quart nord-est du domaine qui favorise à cet endroit le déclenchement de la convection.

Les figures IV.3.12 et IV.3.13 montrent les précipitations accumulées journalières moyennées sur le domaine de la grille 1 et celui de la grille 2 pour la simulation et pour chaque jeu de données (GPCP, TRMM et le modèle), ainsi que les variations des précipitations accumulées journalières autour de leur valeur moyenne sur la période simulée pour chaque jeu de données. En premier lieu, on constate que le modèle reproduit correctement les deux périodes correspondant à deux régimes différents de précipitations sur la période simulée : une première période du 14 au 24 février pendant laquelle la convection est très active et pour laquelle les précipitations sont au-dessus de la valeur moyenne et la période suivante de moindre activité convective pour laquelle les précipitations sont majoritairement au-dessous de la valeur moyenne.

Pour la grille 1, les variations journalières sont généralement suivies par le modèle. Les moyennes journalières des précipitations accumulées sur le domaine de la grille 1 sont de  $3.51 \text{ mm/jour}$  pour le modèle, de  $5.19 \text{ mm/jour}$  pour GPCP et de  $4.57 \text{ mm/jour}$  pour TRMM. Les précipitations accumulées dans le modèle sont donc en moyenne significativement en dessous des précipitations accumulées observées. La variabilité des précipitations accumulées journalière est également plus faible dans le modèle que ne le montrent les observations. Les écart-types des précipitations sont de  $0.74 \text{ mm/jour}$  dans le modèle, de  $1.15 \text{ mm/jour}$  dans le produit TRMM et de  $1.26 \text{ mm/jour}$  pour le produit GPCP. Le modèle sous-évalue donc les précipitations et l'amplitude de leurs variations par rapport à la valeur moyenne sur la période simulée. Cependant, il existe des différences dans la quantité de précipitations accumulées donnée par les produits de TRMM et de GPCP. Les estimations des taux de précipitations de TRMM et de GPCP comportent donc de fortes incertitudes. Bien que sous-évaluées, les précipitations accumulées simulées sont compatibles avec les différences observées entre les produits de TRMM et de GPCP.

Sur la grille 2, les variations journalières sont également bien suivies par le modèle, en particulier pour les périodes du 20 au 25 février et du 7 au 12 mars. Les valeurs moyennes journalières des précipitations accumulées sur le domaine de la grille 2 sont de  $5.29 \text{ mm/jour}$  pour le modèle, de  $7.84 \text{ mm/jour}$  pour GPCP et de  $5.7 \text{ mm/jour}$  pour TRMM. Les écart-types des précipitations accumulées journalières sont de  $2.87 \text{ mm/jour}$  pour le modèle, de  $3.2 \text{ mm/jour}$  pour TRMM et de  $4.42 \text{ mm/jour}$  pour GPCP. Que ce soit pour les valeurs moyennes ou pour la variabilité, le modèle est en accord avec les estimations de TRMM sur ce domaine.

Ces comparaisons montrent que malgré une sensibilité importante de la paramétrisation de la convection à l'orographie, les variations journalières des précipitations accumulées totales (sommées sur tout le domaine) simulées sont en bon accord avec celles fournies par les produits de TRMM et de GPCP. Le modèle reproduit notamment deux périodes distinctes observées : une période de plus forte activité convective jusqu'au 24 février suivie d'une période de moindre activité convective. Les précipitations sur la grille 1 sont globalement sous-évaluées malgré un déclenchement trop fréquent de la convection sous-maille aux abords des Andes. Sur la grille 2, les précipitations à grande échelle dues à la SACZ sont en bon accord avec les estimations de TRMM et de GPCP en intensité et en

localisation.

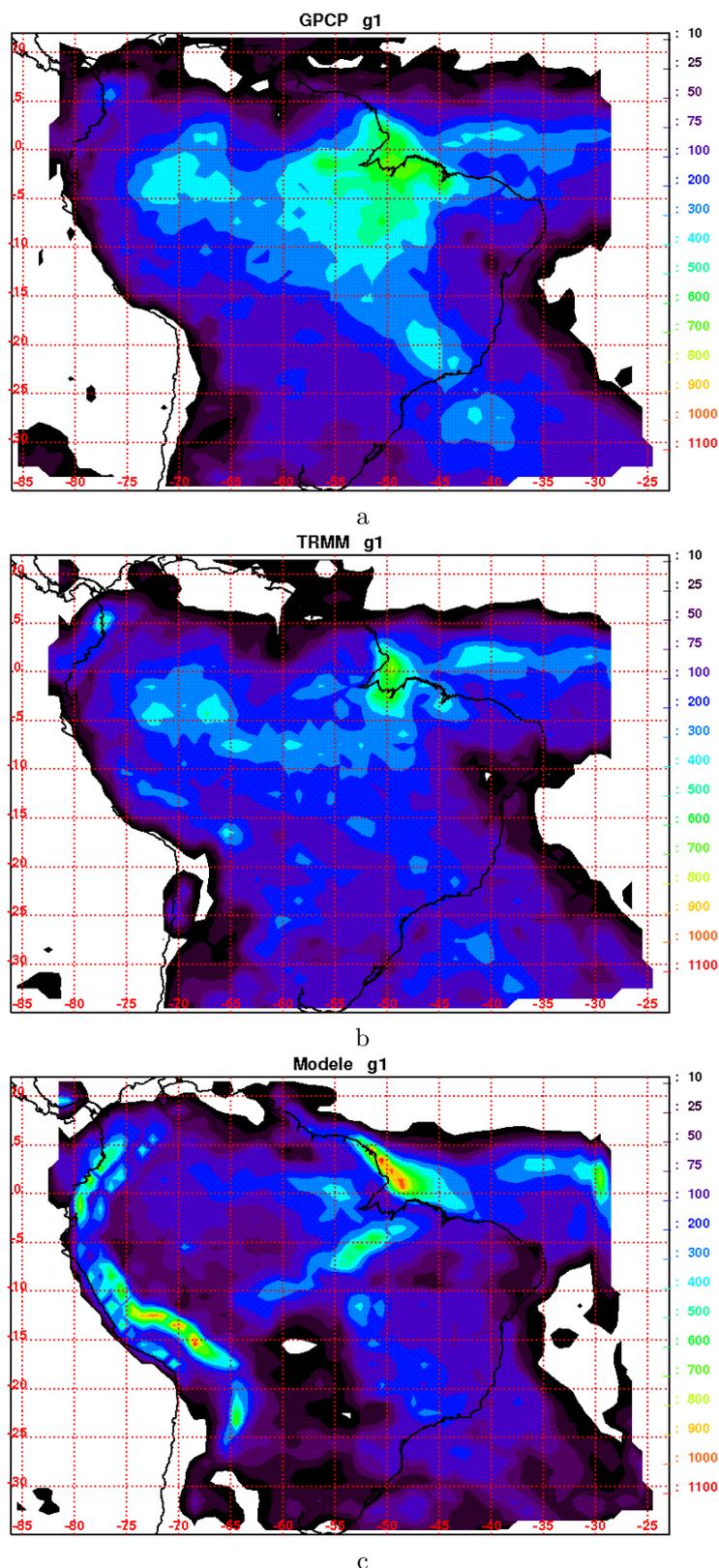


FIG. IV.3.9 – Précipitations accumulées (mm) estimées à partir d'observations (GPCP (a) et TRMM (b)) et simulées (c) sur la grille 1 pour la période du 11 février au 15 mars 2004.

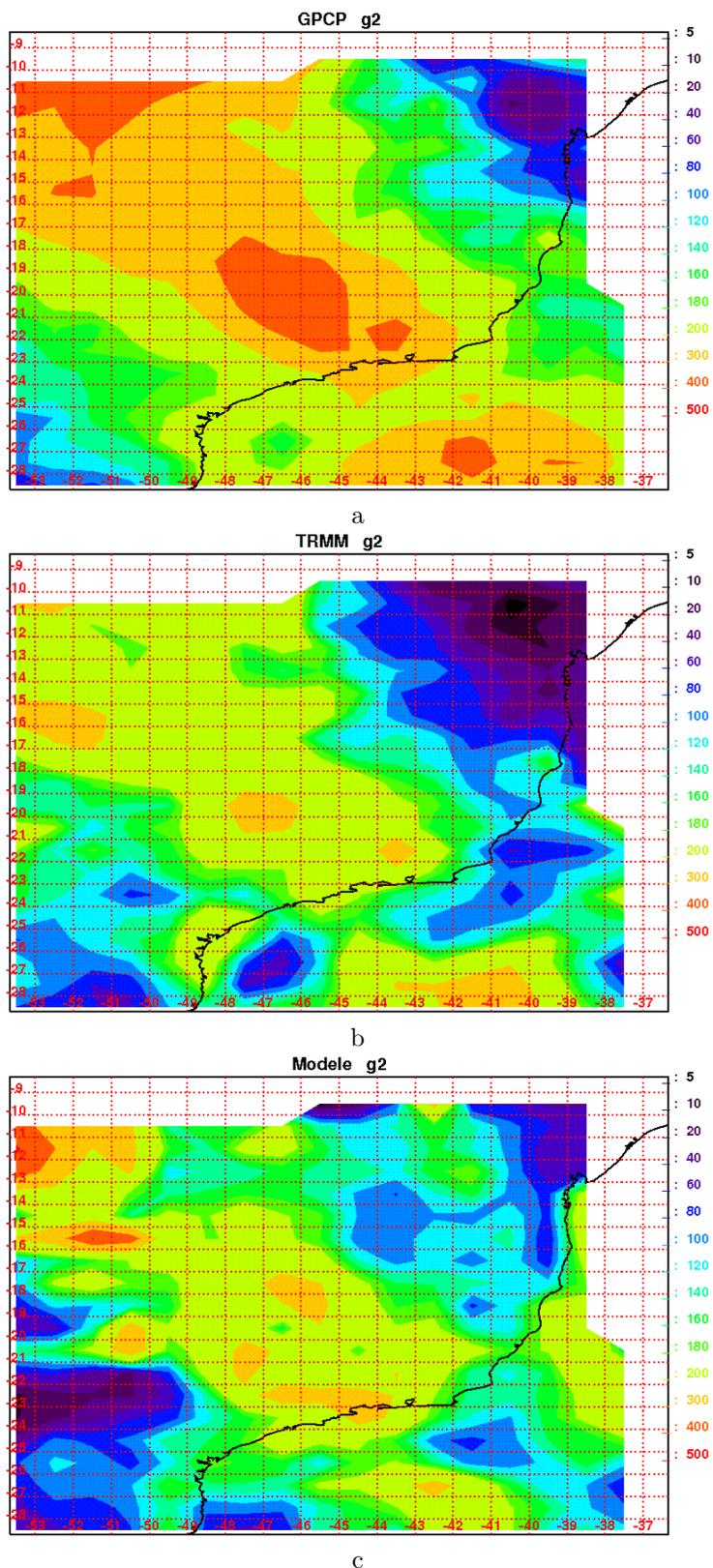


FIG. IV.3.10 – Figure similaire à la figure IV.3.9 mais pour la grille 2.

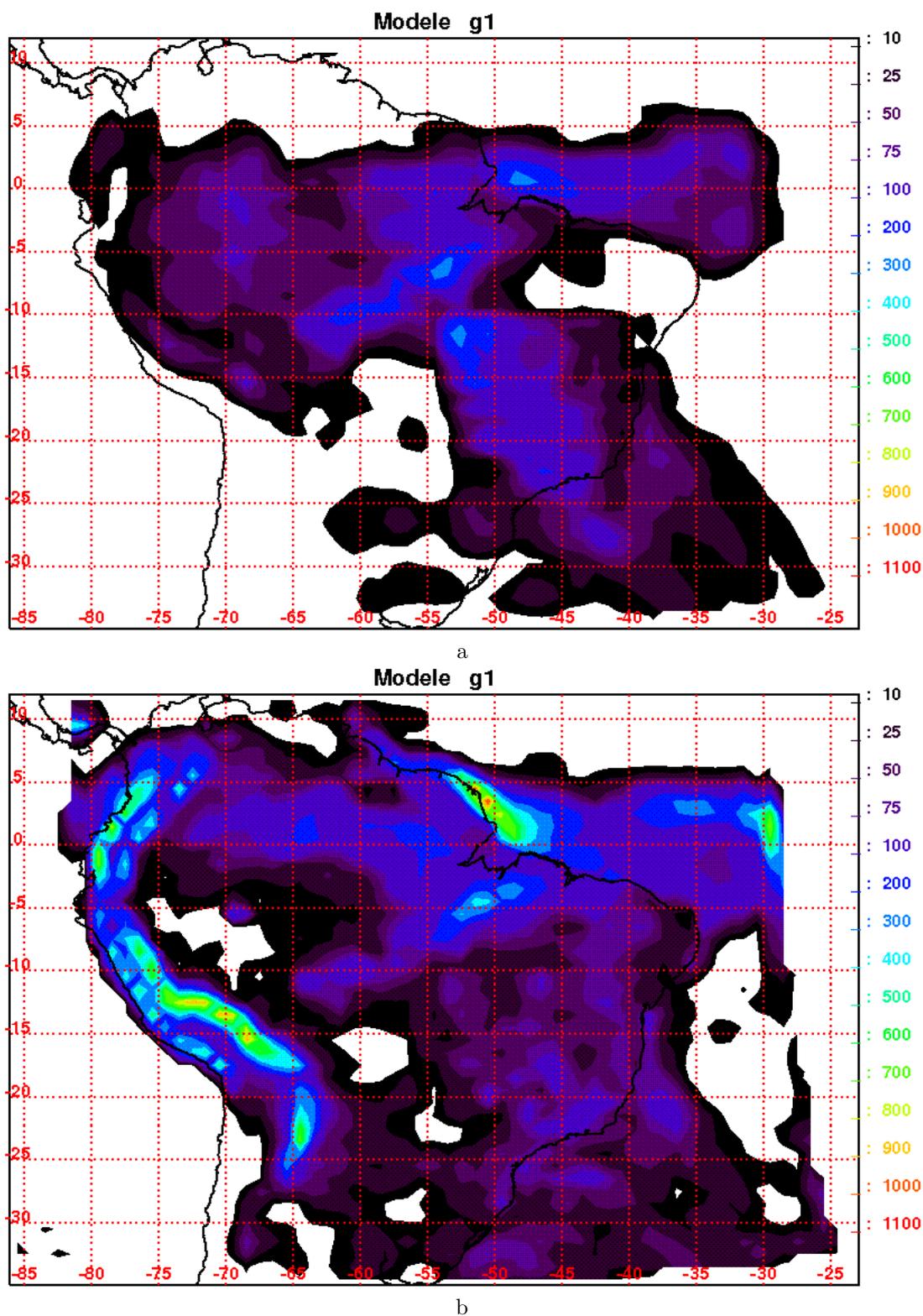


FIG. IV.3.11 – Précipitations accumulées (mm) fournies par le schéma microphysique (a) et fournies par la paramétrisation de la convection (b) sur la grille 1 pour la période du 11 février au 15 mars.

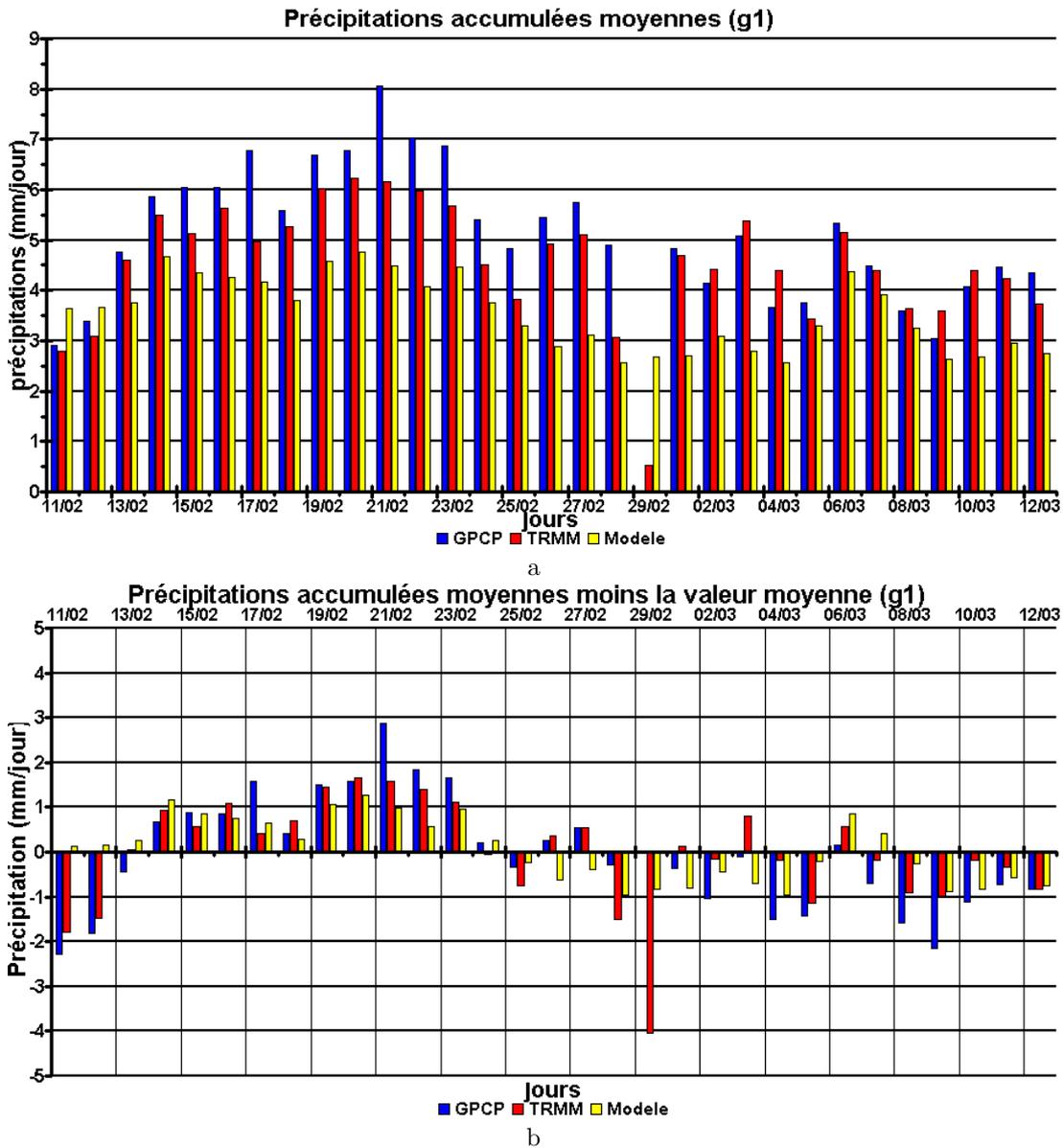
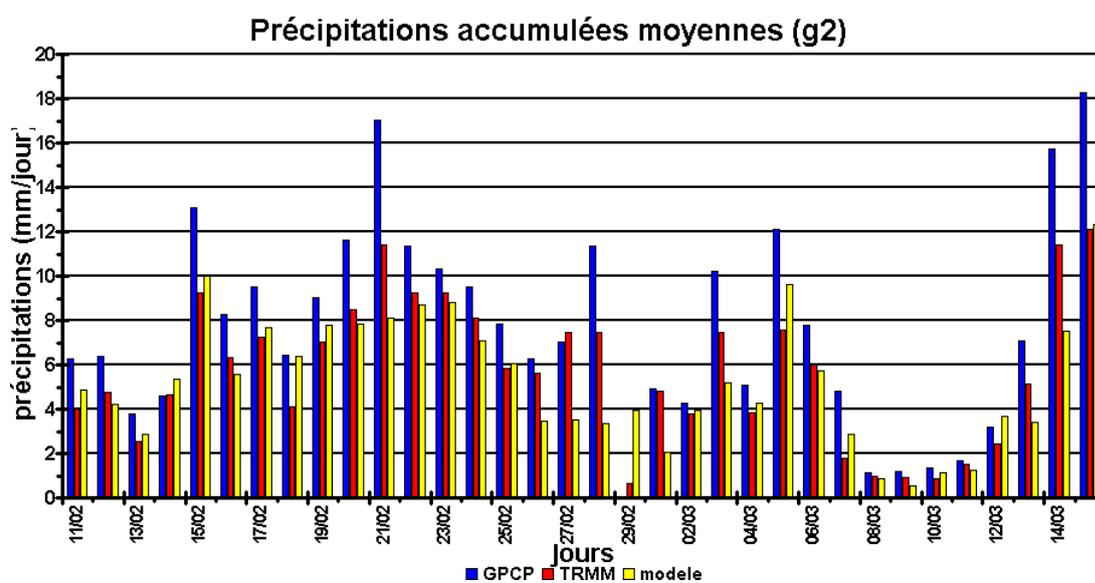
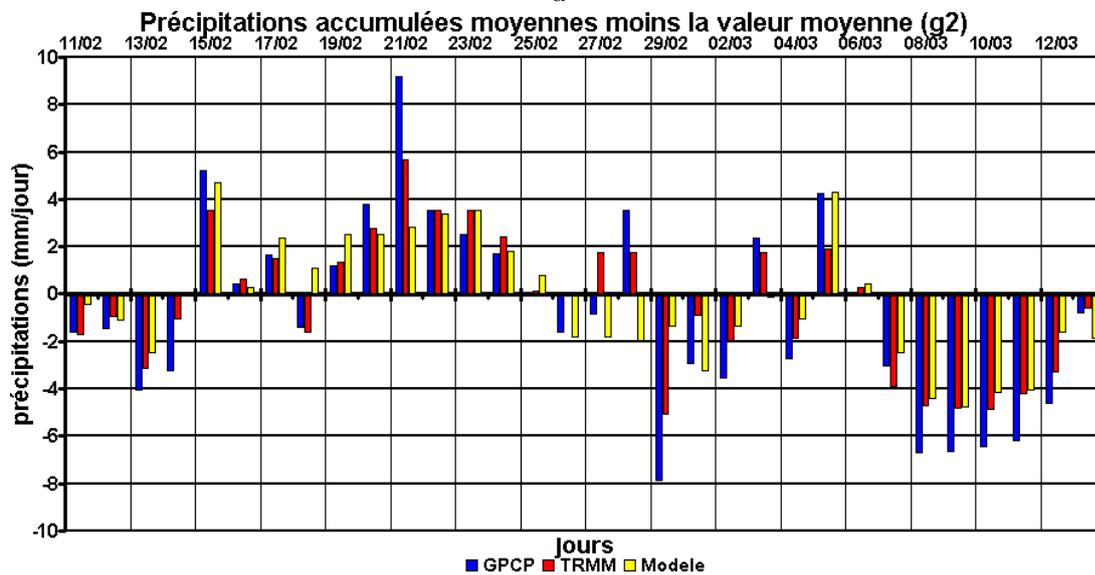


FIG. IV.3.12 – Précipitations accumulées journalières sommées sur le domaine couvert par la grille 1 (mm) (a) et leurs variations par rapport à leur valeur moyenne (b).



a



b

FIG. IV.3.13 – Figure similaire à la figure IV.3.12 pour la grille 2.

### IV.3.2.2 Radio-sondages

Les radio-sondages utilisés (une cinquantaine) ont été lancés depuis Bauru (-22.36°N, -49.02°E) au Brésil durant la campagne TROCCIBRAS de février et mars 2004. La ville de Bauru est située dans la grille 2 et subit l'influence de la SACZ. Les radio-sondages étant localisés en un lieu donné et à un instant donné (0, 6, 12, 18 heures UTC pour une journée), il suffit d'interpoler bilinéairement les données horaires du modèle à la longitude et à la latitude correspondante pour chaque profil vertical donné par les radio-sondages. Les statistiques sont ensuite faites à partir des radio-sondages et des données du modèle. Les quantités analysées sont la température, la direction et la vitesse du vent horizontal, l'humidité spécifique et l'humidité relative. Les profils moyens et les différences moyennes par altitude sont montrés sur les figures IV.3.14 à IV.3.17. Les biais moyens et les biais en valeur absolue moyens figurent dans le tableau IV.3.1. Le biais moyen est donné car il apporte une information sur la tendance générale du modèle et le biais en valeur absolue moyen est donné car il apporte une information sur l'amplitude moyenne de l'erreur en valeur absolue (sans compensation entre les biais négatifs et les biais positifs). La corrélation apporte une information supplémentaire sur l'accord entre les variations des grandeurs mesurées et celles des grandeurs simulées.

La température simulée est en bon accord avec la température observée, comme le montre la figure IV.3.14. L'écart en valeur absolue est au plus d'environ 2°C, le biais moyen est de 0.17°C et le biais en valeur absolue moyen est de 1.12°C. En dessous de 1.5 km, la température est en moyenne un peu plus sous-évaluée par le modèle que sur le reste du profil. Au-dessus de 12 km, la température est en moyenne sur-évaluée. Ceci provient en partie du lissage dû à la résolution verticale du modèle (de 900 m sur cette gamme d'altitudes), mais principalement d'une tendance du modèle à simuler une TTL insuffisamment froide. En particulier, la température du point froid est sur-estimée. Les variations verticales de la température sont également bien suivies par le modèle comme le montre la figure de corrélation (IV.3.18), excepté autour de 4 km et de 12.5 km où la corrélation se situe entre environ 0.3 et 0.4. Ces valeurs sont plus basses que la valeur moyenne de la corrélation calculée sans prendre en compte ces faibles valeurs (environ 0.8).

Le vent horizontal est en moyenne bien reproduit par le modèle (figures IV.3.15 et IV.3.16). Le biais moyen pour la vitesse est de -1.3 m/s et le biais en valeur absolue moyen d'environ 2.5 m/s, avec un écart maximal compris entre -7 et 4 m/s. Ces valeurs restent faibles en regard de la valeur des vitesses moyennes mises en jeu (près de 25 m/s aux altitudes où le biais est le plus fort), indiquant un bon accord des vitesses simulées avec les vitesses mesurées. La sous-estimation aux environs de 12 km correspond à la sous-estimation par le modèle des gradients liés au jet subtropical. Les variations de la vitesse du vent sont bien suivies par le modèle avec une corrélation supérieure à 0.5. Les légères baisses de corrélation près du sol et en altitude (à environ 18 km) ne montrent pas de fort désaccord entre le modèle et les mesures. Il est à noter que bien que les biais les plus importants soient situés entre environ 8 et 14 km (figure IV.3.15), la corrélation est bonne à ces altitudes (figure IV.3.18 a), montrant l'aptitude du modèle à suivre les variations verticales du jet subtropical au-dessus de Bauru.

La direction moyenne du vent est très bien reproduite entre 6 et 15 km où le biais moyen tend vers 0 et avec un écart-type de 20° environ (figure IV.3.16). Malgré un écart-type du biais plus important au dessus de 15 km dans la couche d'absorption, la direction moyenne est bien suivie par

le modèle. Au-dessus de Bauru, les mouvements des masses d'air au-dessus de 6 km sont donc bien reproduits. En dessous de 6 km, le biais est plus important, atteignant environ 20° en valeur absolue, avec un écart-type beaucoup plus important que pour les altitudes supérieures (dépassant 50° en valeur absolue). Ainsi, bien que la vitesse du vent soit mieux reproduite dans les basses couches de la troposphère, il y a une erreur plus importante sur la direction du vent, en particulier là où les émissions sont les moins diluées. Les variations de la direction du vent sont en moyenne moins bien suivies, en particulier dans les basses couches et en altitude comme le montre la corrélation (figure IV.3.18). La figure IV.3.18 (b) montre l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur quadratique moyenne systématique (RMSEs) et l'erreur quadratique aléatoire (RMSEu). La part des erreurs systématiques reste assez faible sur tout le profil en regard des erreurs aléatoires, indiquant une erreur principalement liée au bruit, c'est à dire dans ce cas aux fluctuations rapides des grandeurs mesurées que le modèle ne peut reproduire du fait de la résolution employée. Cela montre qu'il s'agit probablement de l'effet de la résolution de la grille du modèle pour les basses couches, très turbulentes, et d'un effet de la zone de forçage en altitude qui oblige les grandeurs forcées à tendre vers les champs moyens de grande échelle.

L'humidité simulée est en bon accord avec les mesures. Il est à noter que les mesures possèdent un biais sec connu, comme cela a été vu dans la partie III.1.3. Ce biais a été partiellement corrigé et un filtre a été appliqué de manière à ne conserver que les mesures a priori correctes. Le biais moyen et le biais en valeur absolue moyen ne sont pas donnés pour l'humidité spécifique puisque celle-ci varie exponentiellement avec l'altitude, impliquant une variation sur plusieurs ordres de grandeur. Le biais moyen pour l'humidité relative est de 6.2% et le biais en valeur absolue moyen de 15%. Dans l'ensemble, l'humidité dans le modèle est trop élevée, en particulier dans les basses couches en-dessous de 2 km où l'erreur quadratique moyenne sur l'humidité spécifique est principalement systématique et aléatoire dans la moyenne et haute troposphère. L'humidité dans le modèle est analysée plus en détails par la suite à partir des comparaisons avec les mesures aéroportées, plus précises que les mesures des radio-sondages.

Un point important est la variabilité des grandeurs simulées. On peut voir sur les profils verticaux moyens montrés sur les figures IV.3.14 à IV.3.17 que cette variabilité est très proche de celle des grandeurs mesurées, hormis pour l'humidité spécifique, pour lesquelles la variabilité baisse fortement au-dessus de 15 km. Ces chutes sont dues au forçage appliqué au-dessus de 15 km qui fait converger les champs simulés vers les analyses globales du CPTEC. La comparaison entre les valeurs simulées et les mesures au-dessus de 15 km montrent que les analyses utilisées sont ici en bon accord avec les mesures pour le vent et la température.

De manière générale, le modèle et les mesures effectuées par les radio-sondages lancés depuis Bauru sont en bon accord. Les corrélations plus faibles que la corrélation moyenne et les biais sont vraisemblablement principalement liés à l'impact de la résolution du modèle sur les valeurs simulées. Le modèle a tendance à sous-estimer les gradients trop importants tels le jet subtropical ou le minimum de température à la tropopause. Dans les basses couches où la variabilité spatio-temporelle est importante, c'est la différence de résolution entre les mesures et le modèle qui joue le plus.

	Biais moyen	Biais en valeur absolue moyen
Température (°C)	0.17	1.12
Direction du vent (°)	-5.4	34.1
Vitesse du vent (m/s)	-1.3	2.5
Humidité relative (%)	6.2	15

TAB. IV.3.1 – *Biais moyens et biais en valeur absolue moyens entre le modèle et les radio-sondages.*

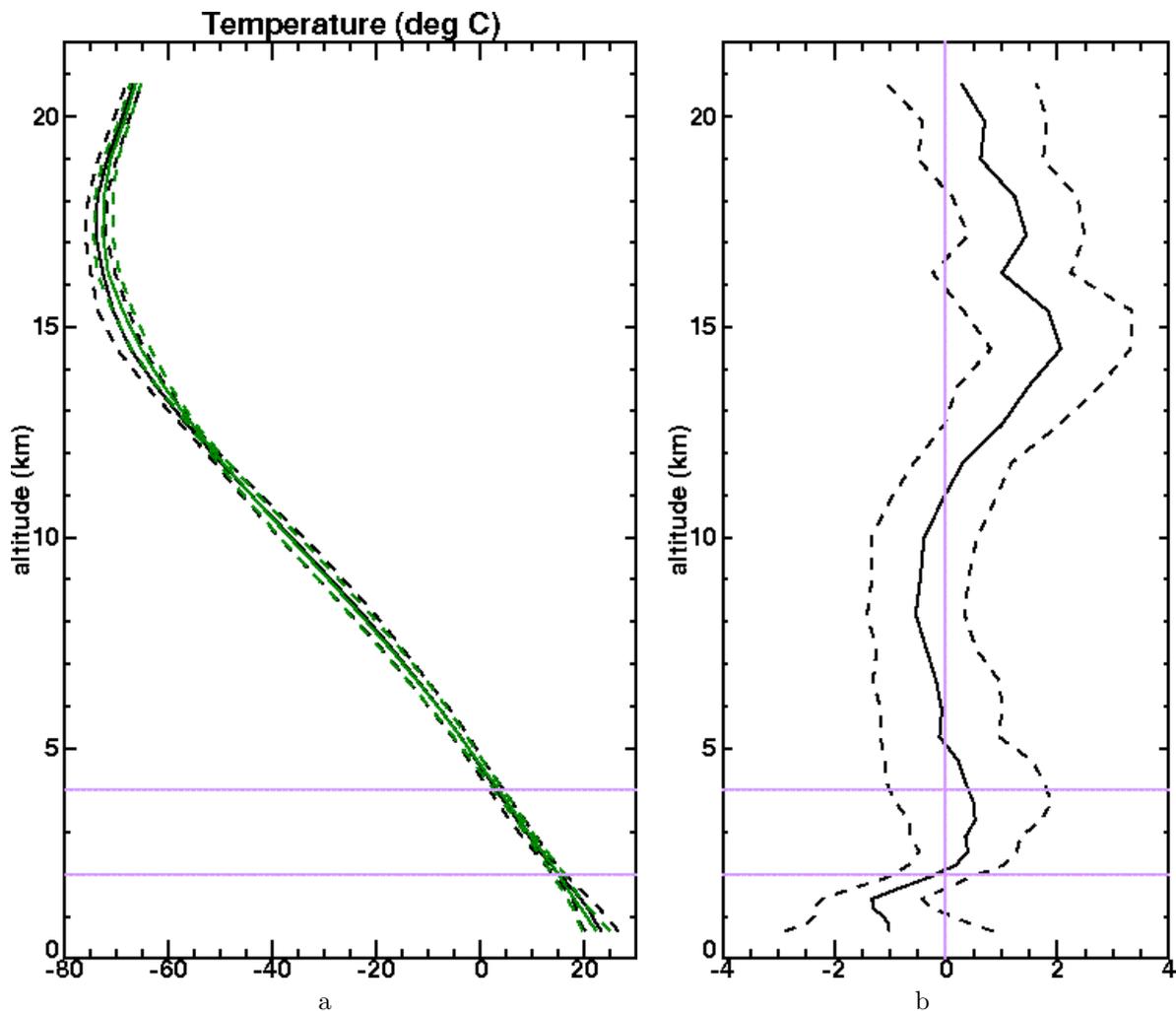


FIG. IV.3.14 – *Profils moyen (traits pleins) et profils moyen plus ou moins l'écart-type (pointillets) pour la température (en a, les radio-sondages sont en noir et le modèle en vert) et profil vertical des différences moyennes modèle-observations (trait plein) et des différences moyenne plus ou moins l'écart-type des différences (pointillets) associé (b).*

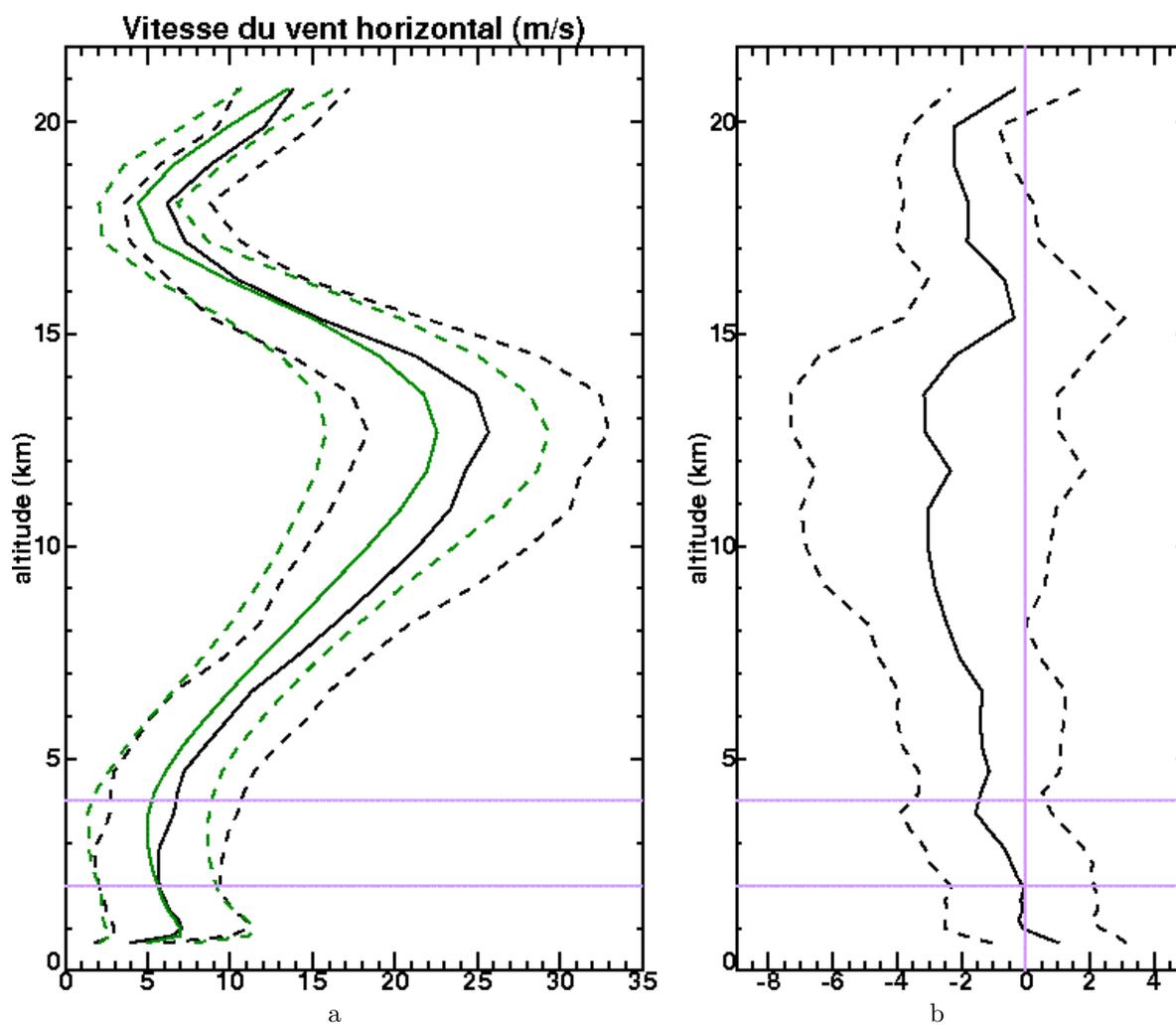


FIG. IV.3.15 – Figure similaire à la figure IV.3.14 pour la vitesse du vent horizontal.

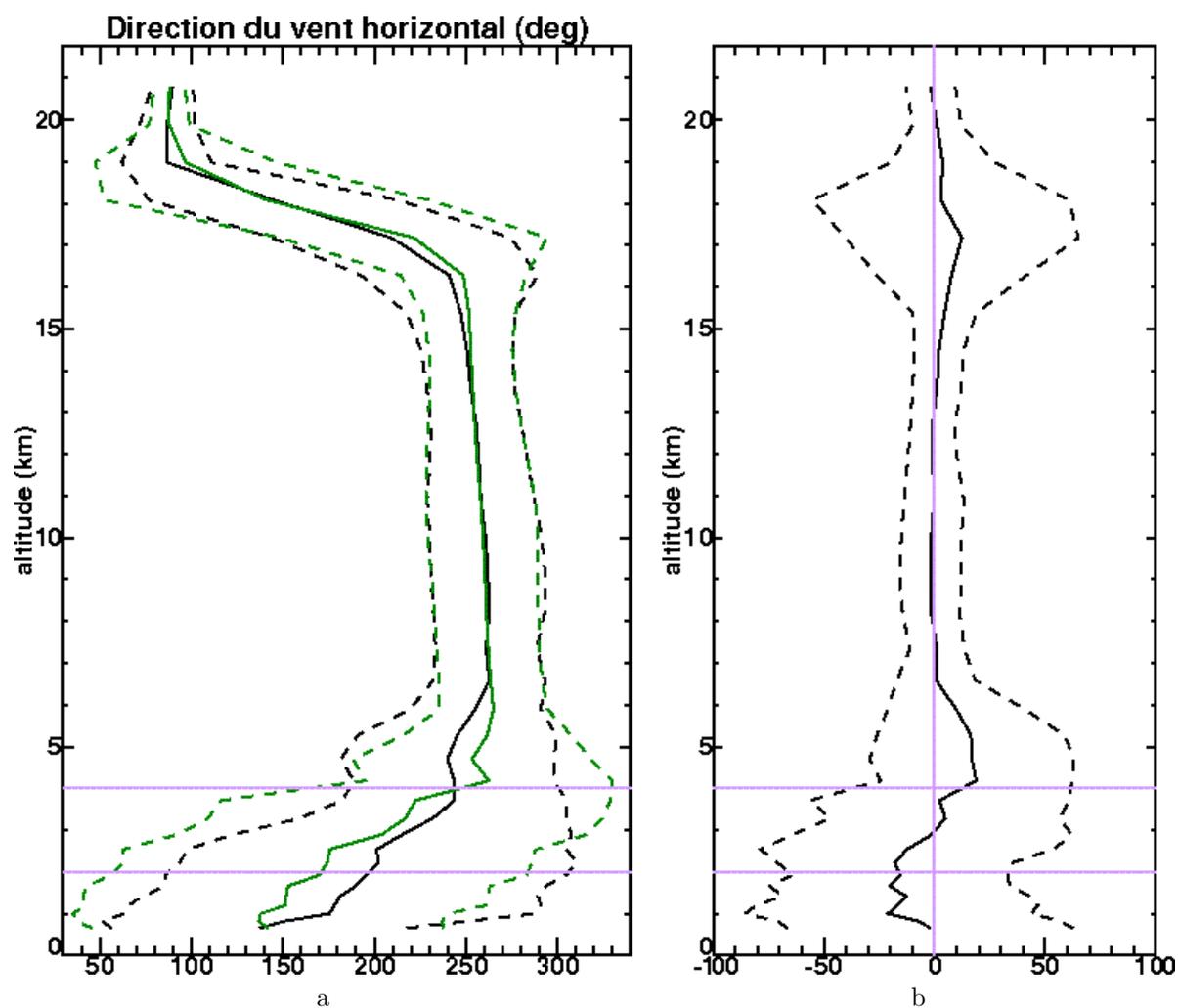


FIG. IV.3.16 – Figure similaire à la figure IV.3.14 pour la direction du vent horizontal. Les conventions météorologiques placent le nord à  $0^\circ$ , le sud à  $180^\circ$ , l'est à  $90^\circ$  et l'ouest à  $270^\circ$ .

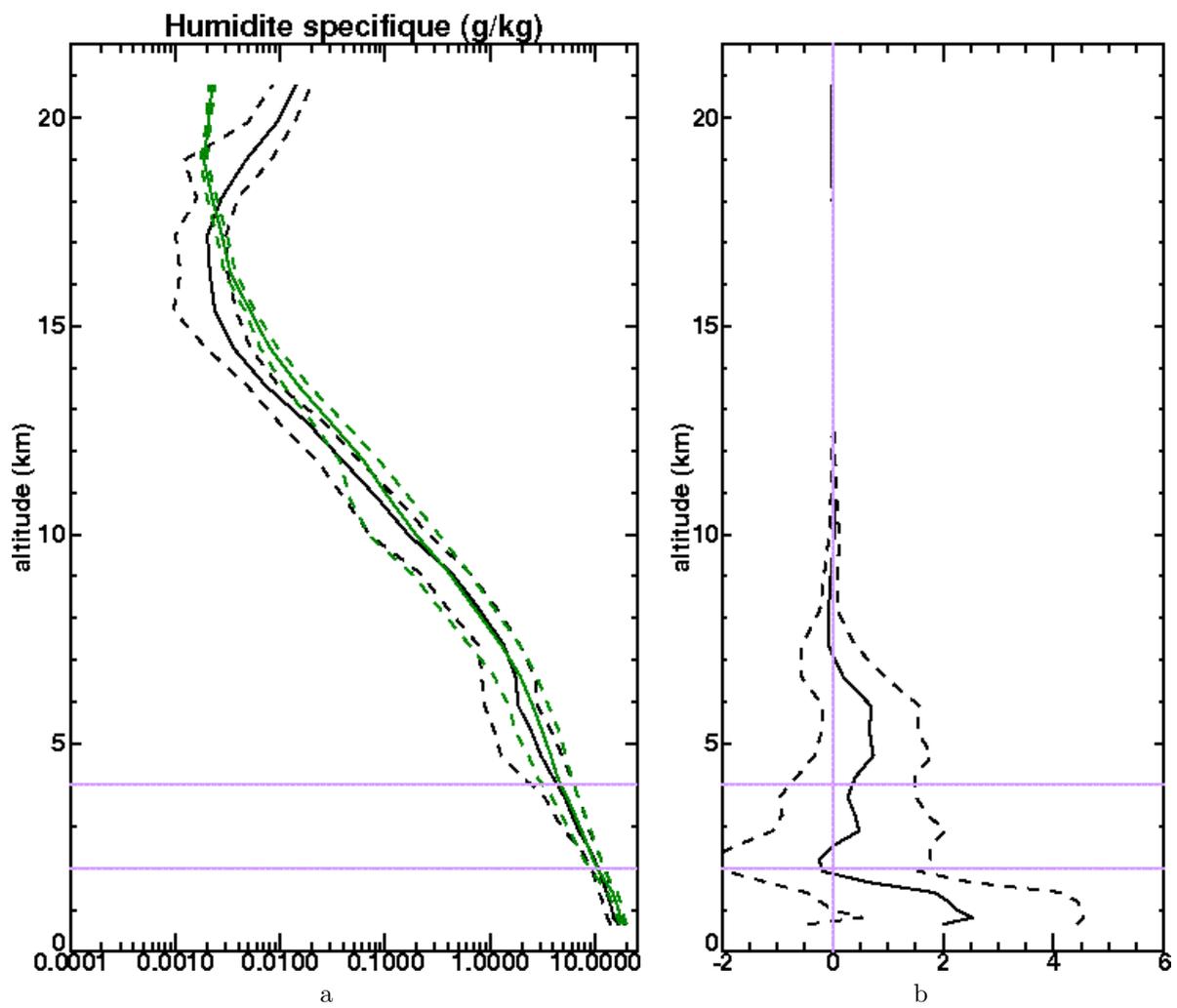
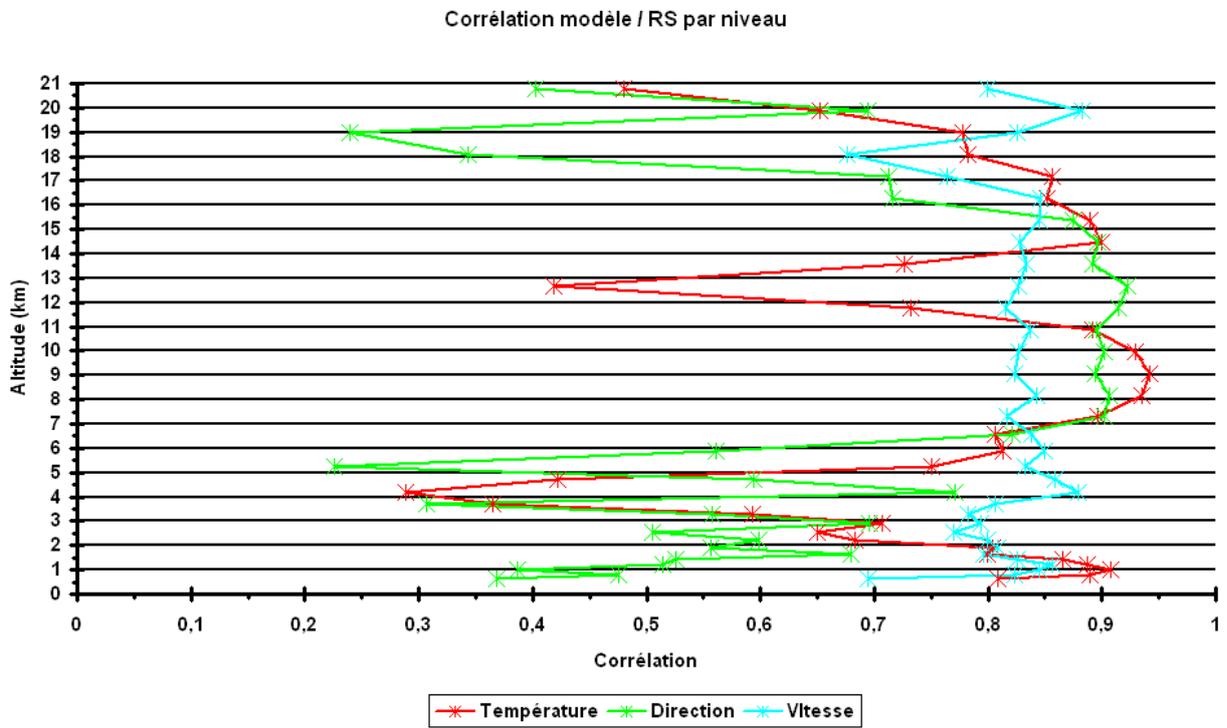
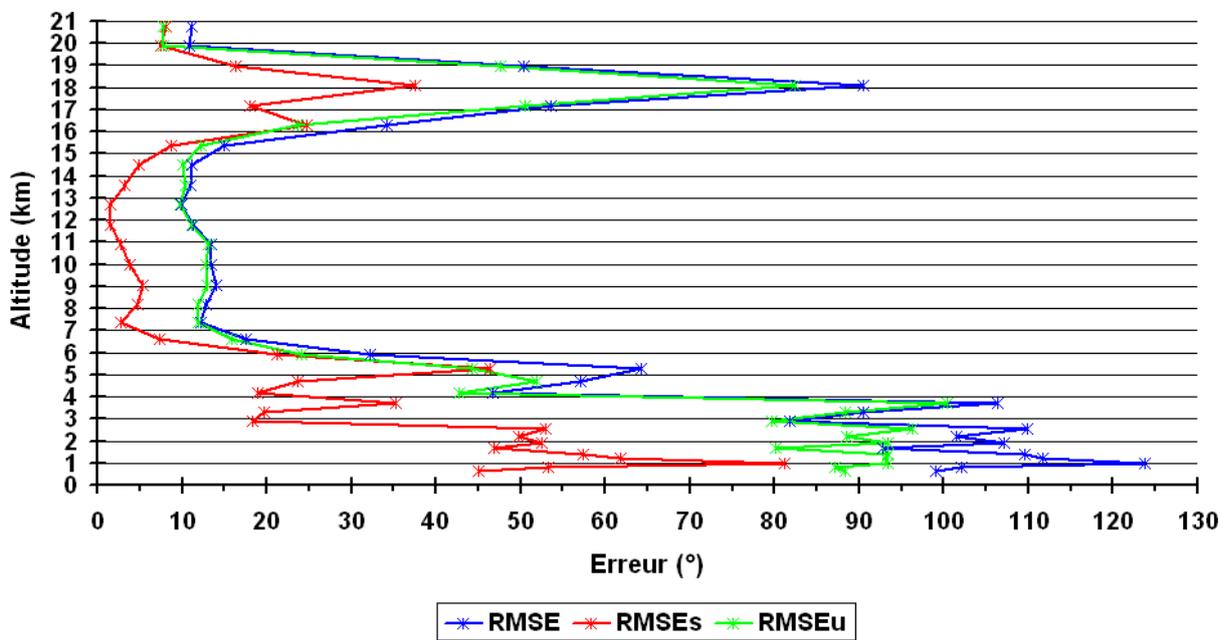


FIG. IV.3.17 – Figure similaire à la figure IV.3.14 pour l'humidité spécifique.



a

**Erreur quadratique moyenne pour la direction du vent**



b

FIG. IV.3.18 – Corrélations entre les radio-sondages et les données extraites des modèles par niveaux verticaux (a) et erreurs quadratiques moyenne, systématique et aléatoire pour la direction du vent (b).

### IV.3.2.3 Mesures aéroportées

Les données météorologiques acquises lors des vols du Falcon permettent de valider le comportement du modèle aux mêmes lieux et aux mêmes instants que les mesures de CO. Nous disposons de 14 vols répartis entre le 13 février 2004 et le 10 mars 2004. Les mesures sont effectuées à des altitudes allant du sol à 13 km environ. Nous pouvons donc tirer de cette comparaison des informations complémentaires à celles obtenues lors de la comparaison aux radio-sondages qui ont été lancés d'un seul site.

La comparaison peut être faite de deux manières, apportant chacune des informations complémentaires. La première consiste à reconstituer la trajectoire de l'avion dans la grille du modèle et à comparer les mesures aux données du modèle le long de cette trajectoire. La deuxième consiste à moyenner toutes les mesures d'un vol ou de tous les vols sur une grille verticale et comparer le profil moyen et l'écart-type au profil moyen et à ceux issus du modèle.

#### Profils verticaux

La comparaison des profils verticaux moyens permet de caractériser la répartition verticale moyenne des grandeurs météorologiques du modèle sur la grille 2 pendant la période de la campagne de mesures. Nous analysons ici les résultats (profils verticaux moyens, différences moyennes et corrélation par niveau) pour la température, la vitesse et la direction du vent, l'humidité spécifique et l'humidité relative. En première remarque sur ces résultats, précisons que le Falcon décolle toujours du même endroit. Par conséquent, les basses altitudes échantillonnées couvrent une superficie moins importante que celle couverte pour les altitudes supérieures. Les figures IV.3.19 à IV.3.23 montrent les profils verticaux moyen et les écart-types associées. Le niveau le plus haut atteint (environ 13 km) et le niveau le plus bas sont peu ou pas échantillonnés et n'ont donc pas été considérés.

Le profil moyen simulé de température est en bon accord avec le profil moyen issu des observations. Le modèle sous-estime très légèrement la température sur l'ensemble du profil, le biais restant inférieur à 3 K. Pour chacun des profils verticaux, la corrélation entre le modèle et les données est très bonne, de 0.8 en moyenne (figure IV.3.24).

L'écart moyen sur la direction du vent est faible sur l'ensemble du profil (figure IV.3.21), mais l'écart-type est important. On peut simplement remarquer que la direction moyenne en-dessous de 2 km est lissée par le modèle et qu'à deux altitudes, 4 et 5.5 km environ, la direction moyenne du vent est moins en accord avec les mesures. Les corrélations par niveaux verticaux pour la vitesse et la direction du vent horizontal sont montrés sur la figure IV.3.24. La corrélation de la direction du vent n'est pas bonne pour deux gammes d'altitudes distinctes (en-dessous de 2 km et entre 4 et 6 km). Pour la vitesse du vent (figure IV.3.20), le biais est faible, généralement inférieur à 3 m/s. La baisse de corrélation dans les basses couches (en-dessous de 2 km, figure IV.3.24) est due à la résolution de la grille.

Des corrélations assez basses entre 3 et 5 km et vers 12.5 km ont déjà été rencontrées lors de la comparaison aux radio-sondages. La gamme d'altitude située entre 3 et 5 km correspond à

la gamme d'altitude où joue préférentiellement la convection restreinte. Il est donc possible que ce soit la paramétrisation de la convection restreinte qui induit un biais positif et une corrélation plus basse. 12.5 km est la hauteur typique du sommet de la convection profonde. La baisse de corrélation à cette altitude peut donc être due à la représentation de la convection profonde dans le modèle. En particulier, deux paramètres peuvent avoir une influence notable. D'une part, dans la paramétrisation de la convection profonde utilisée, aucune ascendance ne peut démarrer au-dessus de 4 km. Cette contrainte supplémentaire est une spécificité du BRAMS qui n'est pas donnée dans la publication originale de Grell *et al.* (1994). D'autre part, les paramétrisations de la convection restreinte et de la convection profonde sont dépendantes de l'épaisseur de la couche stable surplombant la convection restreinte. L'épaisseur de cette couche à partir de laquelle la convection peut se déclencher est un paramètre qu'il est possible de modifier pour adapter le comportement de la convection au cas d'étude (Freitas, communication personnelle). Cependant, les tests effectués sur ce paramètre n'ont pas mené à une amélioration significative de nos résultats.

Les profils moyens pour l'humidité spécifique et l'humidité relative sont en moins bon accord avec les mesures que les grandeurs précédentes. En particulier, que ce soit pour l'humidité spécifique ou l'humidité relative, le modèle sur-évalue l'humidité entre environ 4 km et 8.5 km. Le modèle ne reproduit pas la couche plus sèche observée entre 4 et 7.5 km. Pour l'humidité spécifique et l'humidité relative, le biais dans la couche entre 2 et 4 km est négatif. Or, c'est au-dessus de 2 km (altitude maximale de la couche limite) et en dessous de 4 km que joue principalement la convection restreinte et la convection profonde. Les biais observés sont donc vraisemblablement liés principalement à la distribution verticale de l'humidité par la convection.

### Comparaison le long des trajectoires avion

Cette comparaison nous donne des informations sur la reproduction des champs météorologiques le long des vols avion. Ceci est nécessaire afin de vérifier les performances du modèle à l'échelle locale. Les tableaux IV.3.2, IV.3.3 et IV.3.4 donnent un résumé des résultats obtenus lors de cette comparaison.

Pour la vitesse du vent, la direction du vent et l'humidité spécifique, les biais moyens (MBE), les biais en valeur absolue moyens (MAE) et les corrélations ( $r$ ) sont données. Mais pour la température, les résultats ne sont pas donnés, la corrélation étant bonne (supérieure à 0.9) tout au long des vols et le biais faible, restant en-deçà de 2°. Les statistiques pour l'humidité spécifique ne sont pas données car l'humidité spécifique varie exponentiellement avec l'altitude. Pour la vitesse et la direction du vent horizontal, les résultats sont dépendants des vols, particulièrement pour la direction du vent. Pour la vitesse du vent, le biais reste en deçà de 6 m/s en valeur absolue et à l'exception du vol 2, la corrélation est bonne. Pour la direction, le biais reste inférieur à 16°, ce qui est assez faible, mais le biais en valeur absolue est beaucoup plus élevé. Ceci se traduit par une corrélation généralement nettement moins bonne pour la direction du vent que pour la vitesse du vent. L'étude des erreurs systématiques et aléatoires, dont les valeurs ne sont pas données ici, montrent que les erreurs systématiques et aléatoires participent à hauteur égale à l'erreur globale, avec cependant une tendance à l'erreur systématique au dessus de 11 km pour la vitesse du vent (sous-estimation du jet subtropical) et à l'erreur aléatoire pour la direction du vent (différences de résolution entre le

modèle et les mesures). Les résultats pour l'humidité relative sont également plus dépendants des vols. A l'exception du vol 12, le biais reste inférieur à 20% pour l'humidité relative. La corrélation est dans l'ensemble très moyenne, restant généralement inférieure à 0.6. Pour cette grandeur, les biais sont majoritairement systématiques en dessous de 1.5 km, vers 4 km et aux environs de 12 km, ce qui est cohérent avec les résultats obtenus lors de la comparaison aux radio-sondages.

#### IV.3.2.4 Conclusion

Les grandeurs météorologiques (température, vent, humidité) sont globalement reproduites de manière satisfaisante par le modèle. La comparaison aux radio-sondages et aux données acquises lors des vols du Falcon montrent que la structure verticale moyenne des champs météorologiques est mieux reproduite que leur évolution spatio-temporelle. Néanmoins, le suivi temporel des variations météorologiques est globalement correct, hormis dans la couche limite où la résolution de la grille de calcul ne permet pas la reproduction des variations fines observées. On a également relevé des écarts plus forts ou des baisses de corrélations aux environs de 4 à 5 km et de manière moins importante vers 12.5 km affectant l'ensemble des grandeurs analysées. Ces anomalies, à des altitudes proches des niveaux préférentiels de la paramétrisation de la convection, suggèrent des incertitudes dans la représentation de la convection dans le CATT-BRAMS.

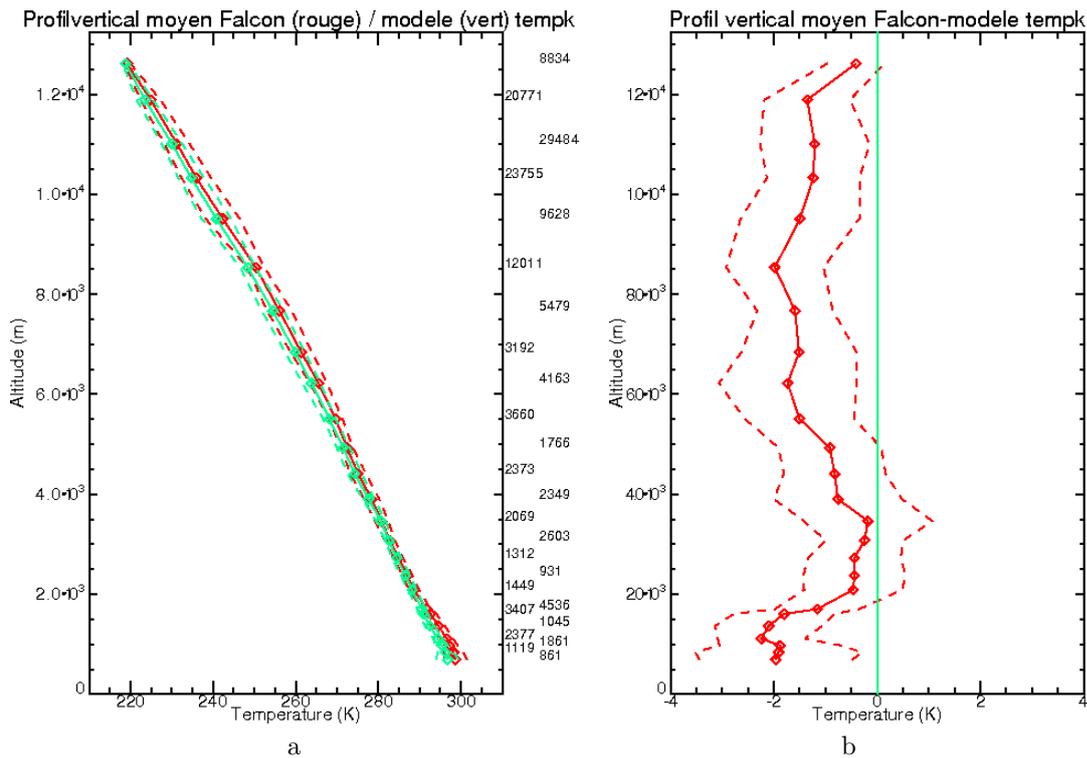


FIG. IV.3.19 – Profils verticaux moyens sur les 14 vols avions (traits pleins) plus ou moins l'écart-type (pointillés) (a) et différences moyennes (trait plein) plus ou moins l'écart-type (pointillés) (b) pour la température (K). Le modèle est en vert et les observations en rouge sur la figure (a). Les chiffres indiqués à droite correspondent au nombre de mesures prises en compte sur le niveau correspondant.

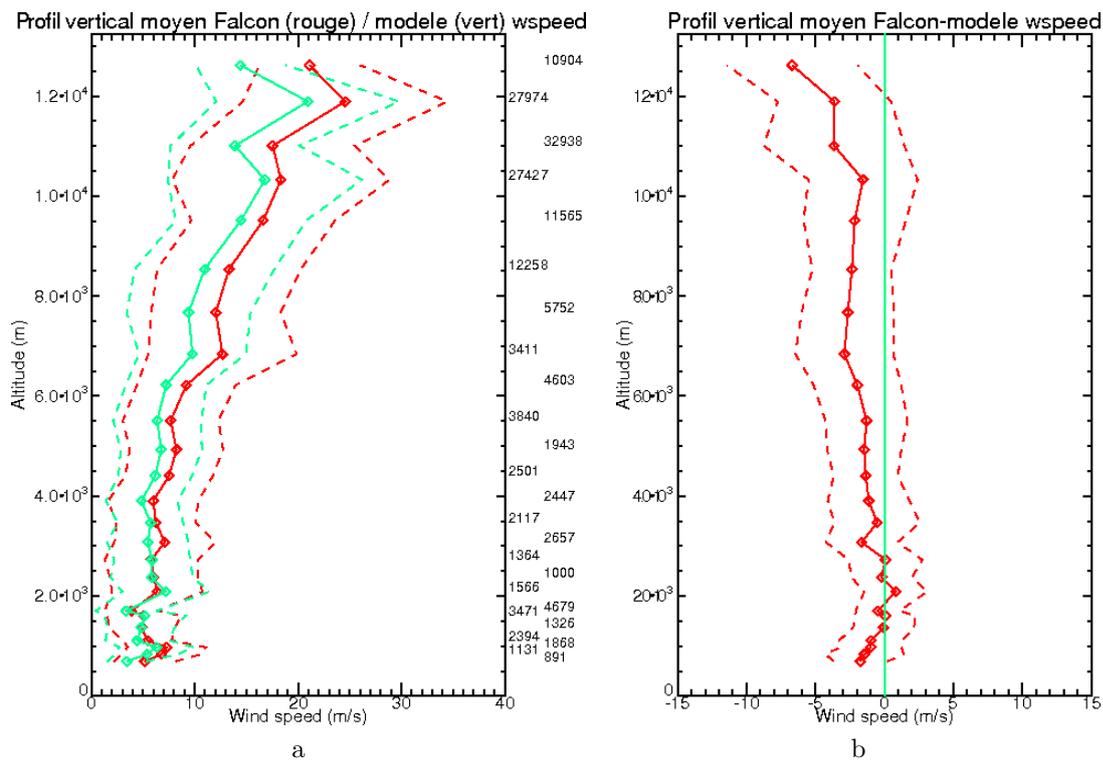


FIG. IV.3.20 – Figure similaire à la figure IV.3.19 pour la vitesse du vent horizontal (m/s).

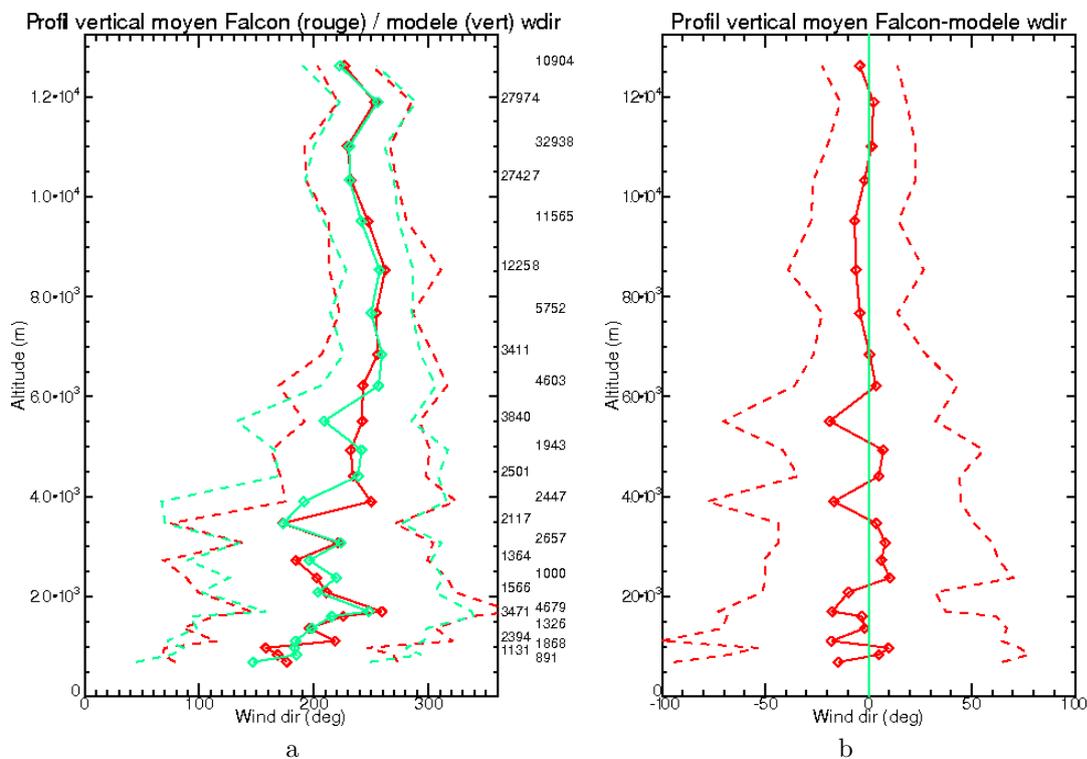


FIG. IV.3.21 – Figure similaire à la figure IV.3.19 pour la direction du vent horizontal (°).

N° de vol	MBE (°)	MAE (°)	r
1	2,89	16,13	0,82
2	0,39	16,83	0,57
3	5,62	13,71	0,54
4	-5	37,62	0,41
5	13,74	28,44	0,03
6	-12,37	20,95	0,23
7	-2,68	19,38	0,41
8	-3,94	6,97	0,65
9	9,24	1,18	0,43
10	-9,66	24,73	0,34
11	-11,49	23,84	0,58
12	-15,21	28,17	0,8
13	-4,78	23,31	0,85
14	0,93	16,38	0,55

TAB. IV.3.2 – Biais moyen (MBE), biais moyen en valeur absolue (MAE) et corrélation (r) pour la direction du vent.

N° de vol	MBE (m/s)	MAE (m/s)	r
1	-4,17	4,49	0,93
2	-3,92	4,91	0,32
3	-0,77	2,74	0,84
4	-1,76	2,61	0,86
5	-5,28	5,7	0,8
6	-1,84	2,84	0,96
7	-2,84	3,21	0,99
8	-1,27	2,66	0,92
9	-3,62	4,47	0,9
10	-0,49	3,72	0,59
11	-1,1	3,02	0,71
12	-3,45	4,53	0,74
13	-4,58	5,24	0,81
14	-2,3	3,3	0,98

TAB. IV.3.3 – Biais moyen (MBE), biais moyen en valeur absolue (MAE) et corrélation (r) pour la vitesse du vent.

N° de vol	MBE (%)	MAE (%)	r
1	6,99	20,66	0,3
2	3,37	16,08	0,34
3	11,38	21,78	0,56
4	14,98	21,67	0,59
5	9,09	27,23	0,14
6	17,04	29,24	0,06
7	0,63	8,81	0,89
8	16,1	21,22	0,46
9	-11,41	19,57	0,07
10	5,3	26,39	-0,25
11	-3,75	19,05	0,28
12	21,31	27,03	0,45
13	10,1	18,45	0,75
14	9,61	16,56	0,53

TAB. IV.3.4 – Biais moyen (MBE), biais moyen en valeur absolue (MAE) et corrélation (r) pour l'humidité relative.

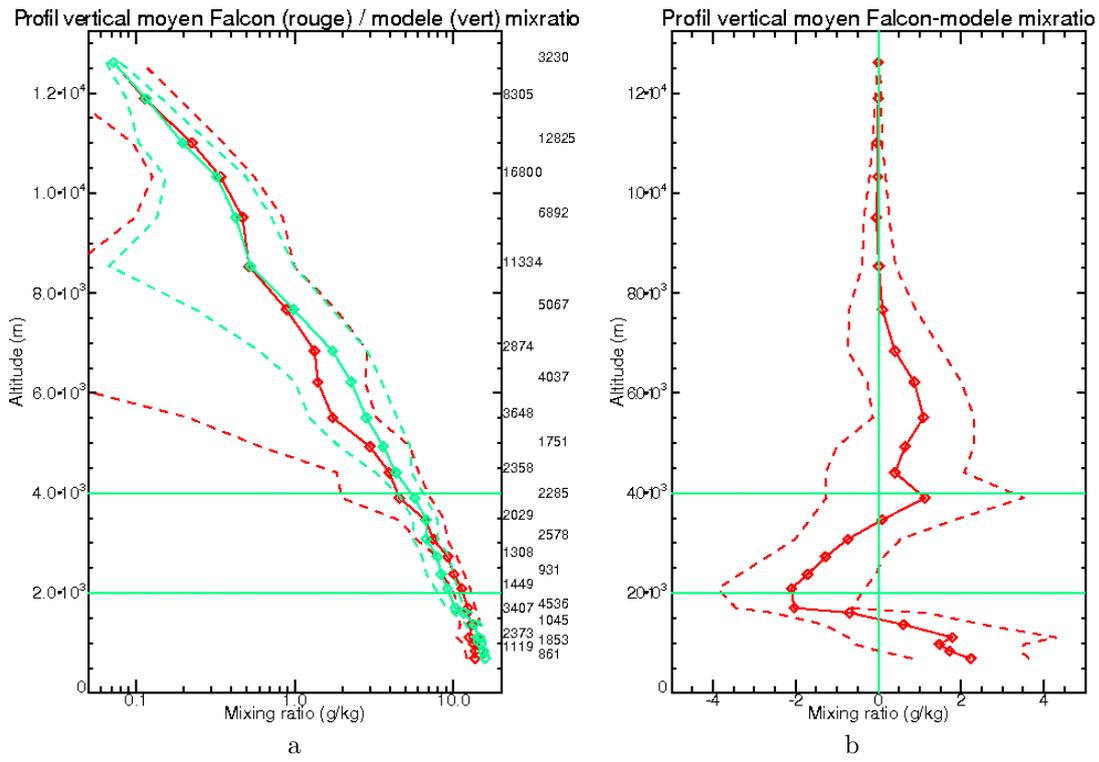


FIG. IV.3.22 – Figure similaire à la figure IV.3.19 pour le rapport de mélange en vapeur d'eau (g/kg).

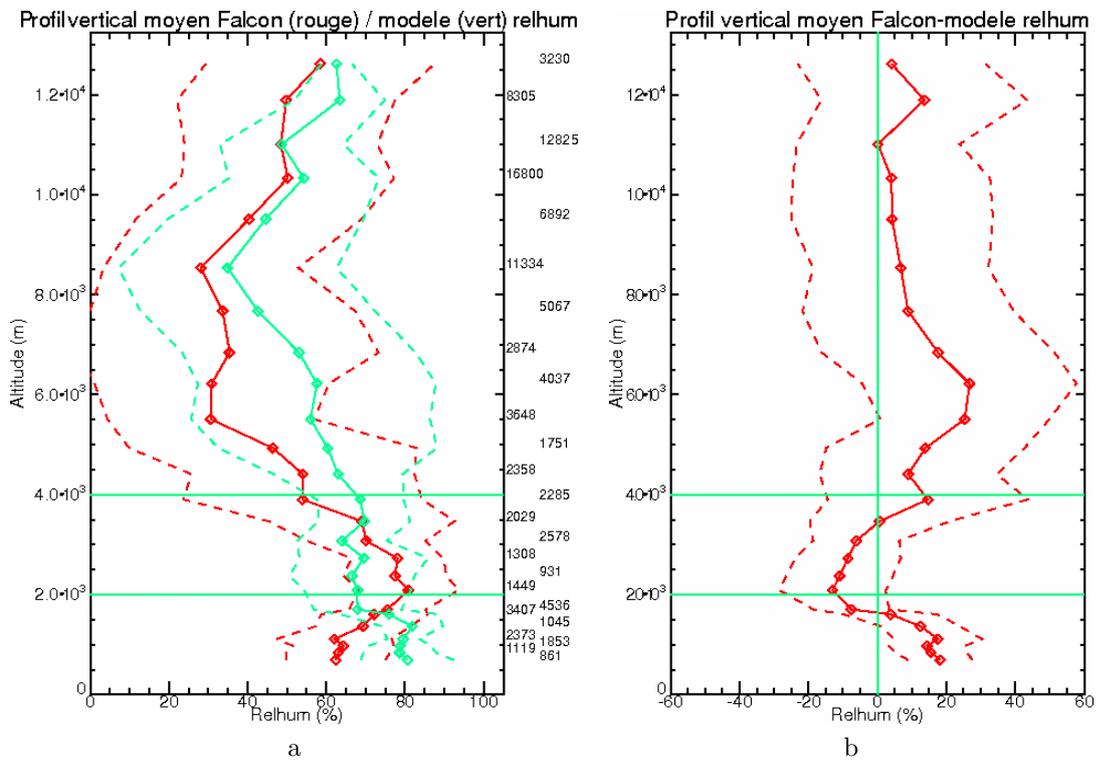


FIG. IV.3.23 – Figure similaire à la figure IV.3.19 pour l'humidité relative (%).

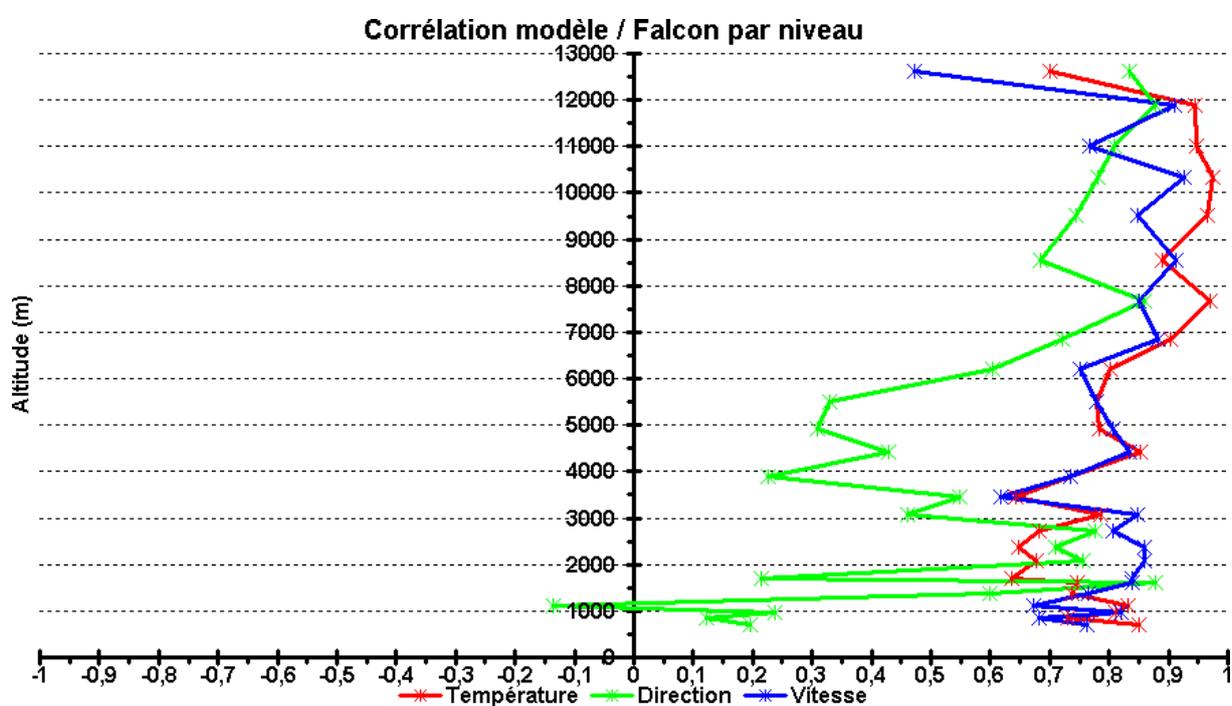


FIG. IV.3.24 – Corrélations entre les données du Falcon et les données extraites du modèles pour chaque niveau vertical.

---

---

## CHAPITRE V

---

Etude de la répartition du CO  
en période convective :  
transport du traceur  $CO$

---

**Table des matières**

---

<b>V.1 Analyse des résultats pour le monoxyde de carbone . . . . .</b>	<b>115</b>
V.1.1 État initial . . . . .	115
V.1.2 Comparaison aux données de MOPITT . . . . .	116
V.1.3 Comparaison aux mesures aéroportées . . . . .	124
V.1.4 Etude de deux vols . . . . .	137
V.1.5 Impact des paramétrisations des processus dynamiques . . . . .	146
<b>V.2 Tests de sensibilité . . . . .</b>	<b>153</b>
V.2.1 Champ de concentration initial . . . . .	153
V.2.2 Inventaires . . . . .	162
V.2.3 Temps de vie du CO . . . . .	166

---

## V.1 Analyse des résultats pour le monoxyde de carbone

Après avoir analysé les résultats météorologiques, nous analysons ici les résultats concernant la simulation de la répartition du monoxyde de carbone. Cette analyse complète celle faite par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) en saison sèche. En particulier, nous y analysons l'influence de l'initialisation, très différente de celle utilisée par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007), l'impact du temps de vie utilisé pour le CO, l'impact des cadastres d'émissions utilisés, ainsi que le rôle de la convection sur la répartition du CO. Nous commençons par valider la simulation de référence et analyser le rôle des transports convectifs dans les résultats obtenus, puis nous analysons les tests de sensibilité concernant l'initialisation, les inventaires d'émissions et le temps de vie du traceur CO.

### V.1.1 État initial

L'état initial de l'atmosphère pour les champs de traceurs est obtenu après une période de spinup de dix jours. Cette durée est suffisante pour que les traceurs émis traversent la grille en longitude ou en latitude, assurant ainsi une bonne cohérence entre la dynamique propre du modèle et le champ de CO. Ceci est illustré sur la figure V.1.1 montrant le champ de CO et le champ de vent associé à 850 et à 150 hPa pour l'initialisation au début de la période de spinup (1<sup>er</sup> février) et l'état initial pour la simulation obtenu à la fin de la période de spinup (11 février).

Au dessus du niveau 350 hPa ( pour les pressions inférieures), de fortes variations sont visibles par rapport à l'état initial : la concentration est plus importante que la concentration initiale. Au dessous, hormis pour le niveau 850 hpa, des variations moins importantes sont observées et le gradient méridien reste plus visible. A tous les niveaux, les variations spatiales de la concentration de CO sont corrélées avec les champs de vent horizontal. Il reste un gradient méridien, mais largement modifié à toutes les altitudes par les émissions et le transport.

A 850 hPa, la moyenne zonale entre l'équateur et 5°N passe d'environ 135 ppbv à environ 115 ppbv. En dessous de 20°S, la tendance est inversée : la moyenne zonale passe d'environ 55 ppbv à environ 75 ppbv. La cause de ces variations est essentiellement liée au transport horizontal du CO, les fortes concentrations le long de l'équateur étant emportées vers le sud. On remarque également une zone de forte concentration au nord-ouest du domaine correspondant à des incendies ayant eu lieu au début du mois de février. Cette augmentation est également visible sur le champ de CO moyen pour Février de MOPITT sur la figure IV.3.2.

Ainsi, la période de spinup a permis de mettre en cohérence le champ de CO initialement introduit avec les champs météorologiques et de modifier notablement la répartition verticale du CO : une concentration dans les basses couches similaire à celle introduite, mais une concentration plus élevée en altitude. Ces modifications sont apportées à la fois par les émissions introduites et le transport horizontal et vertical.

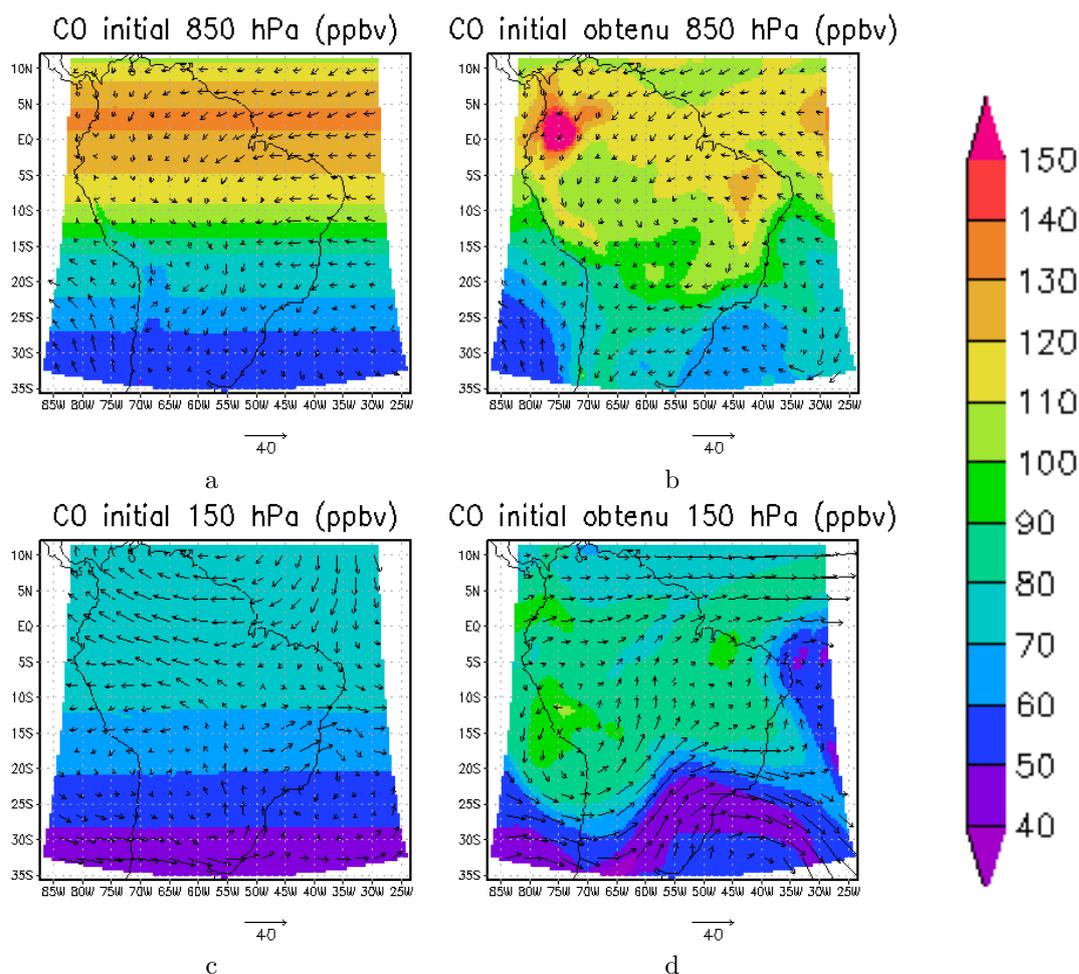


FIG. V.1.1 – Champ de de CO (contour) au début (a et c) et la fin de la période de spinup (b et d) à 850 hPa (a et b) et à 150 hPa (c et d) et champ de vent horizontal (flèches) au niveau de pression correspondant.

## V.1.2 Comparaison aux données de MOPITT

Comme les données de MOPITT ont été utilisées pour l'initialisation du modèle au début de la période de spinup, ce n'est pas une comparaison de données complètement indépendantes qui est faite. Néanmoins, l'initialisation a été calculée à partir des champs de MOPITT moyens mensuels de février et mars 2004 interpolés en latitude et en altitude afin de fournir au modèle un champ de CO de fond réaliste au début de la période de spinup. Dans la comparaison discutée ci-après, ce ne sont pas les moyennes mensuelles qui sont utilisées mais les mesures individuelles de CO de MOPITT (produits journaliers) obtenues au cours de la période de simulation. Elles sont comparées aux moyennes journalières du modèle calculées en appliquant les noyaux de pondération fournis pour chaque estimation de CO de MOPITT (Deeter *et al.*, 2003; Emmons *et al.*, 2004). L'échantillonnage des valeurs du modèle ne prend pas en compte les données manquantes liées au défilement du satellite et à la méthode de mesure qui ne permet pas de connaître la concentration dans une zone nuageuse ou incluant des quantités importantes de fumée. Ceci permet de faire la comparaison la plus objective possible avec les mesures de MOPITT.

L'impact des noyaux de pondération est montré sur les figures V.1.2 et V.1.3. Les différences apparaissent surtout pour les niveaux 850 et 700 *hPa* (figure V.1.2 a et b, c et d), ainsi que pour les niveaux 250 et 150 *hPa* (figure V.1.3 i et h, j et k). Lorsque les noyaux de pondération sont appliqués, la concentration à 850 et 700 *hPa* est plus élevée que sans l'application de ces noyaux. Pour les niveaux 250 et 150 *hPa*, c'est l'inverse, l'application des noyaux de pondération mène à une concentration plus basse que sans l'application des noyaux de pondération. Le maximum local de concentration en altitude est donc déplacé vers le bas lors de l'application des noyaux de pondération. Ainsi, le champ introduit au début de la période de spinup présente deux caractéristiques majeures. D'une part, les profils est de manière générale « écrasé » verticalement, le maximum de CO en altitude étant déplacé vers le bas et la décroissance de la concentration commençant donc également à des altitudes plus basses. D'autre part, les champs issus de MOPITT introduisent également une sur-évaluation initiale de la concentration au début du spinup dans la basse troposphère.

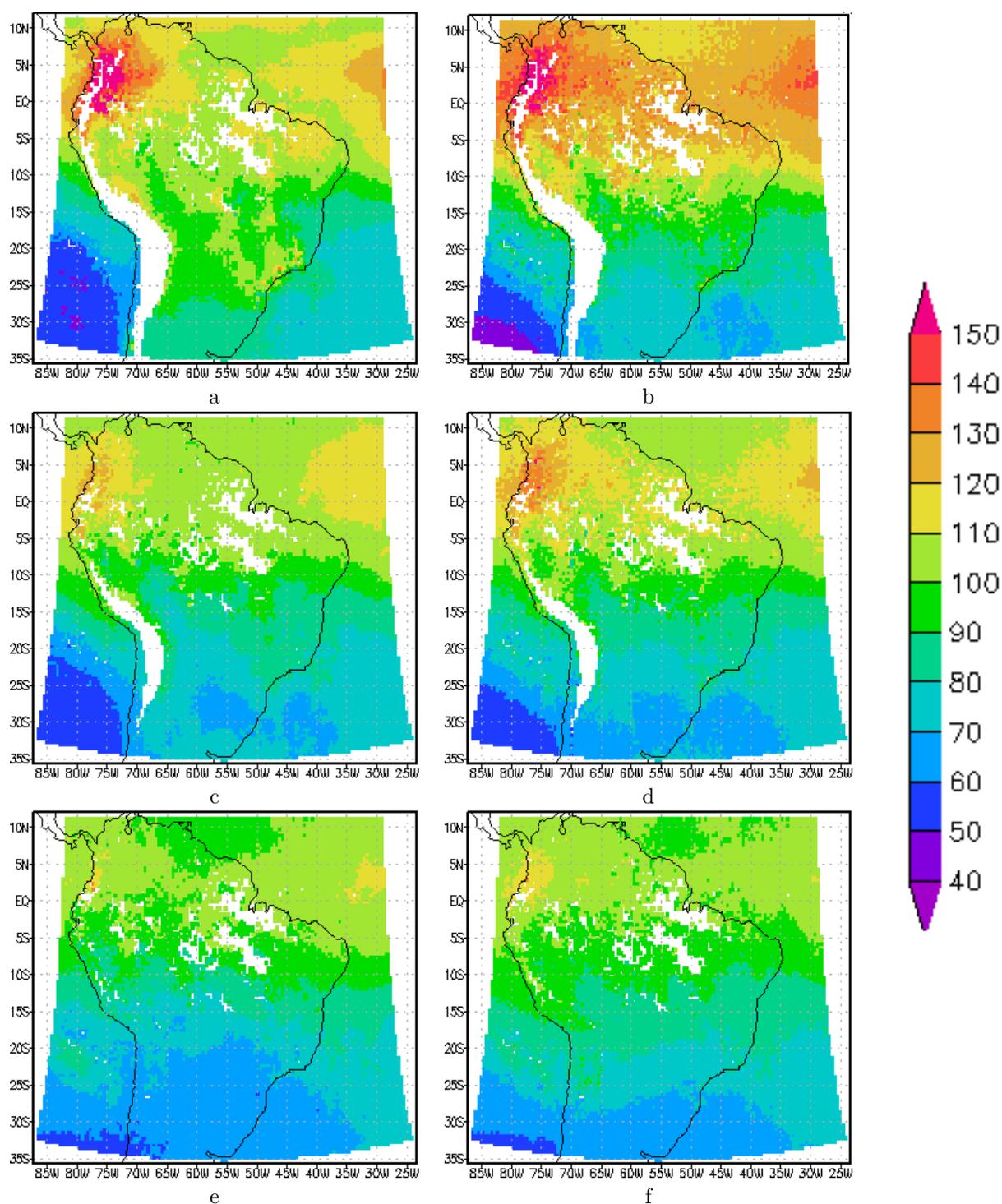


FIG. V.1.2 – Champs de CO moyens sur la simulation du 11 février au 16 mars sans noyaux de pondération (colonne de gauche) et avec noyaux de pondération (colonne de droite) pour les niveaux 850 hPa (a et b), 700 hPa (c et d) et 500 hPa (e et f).

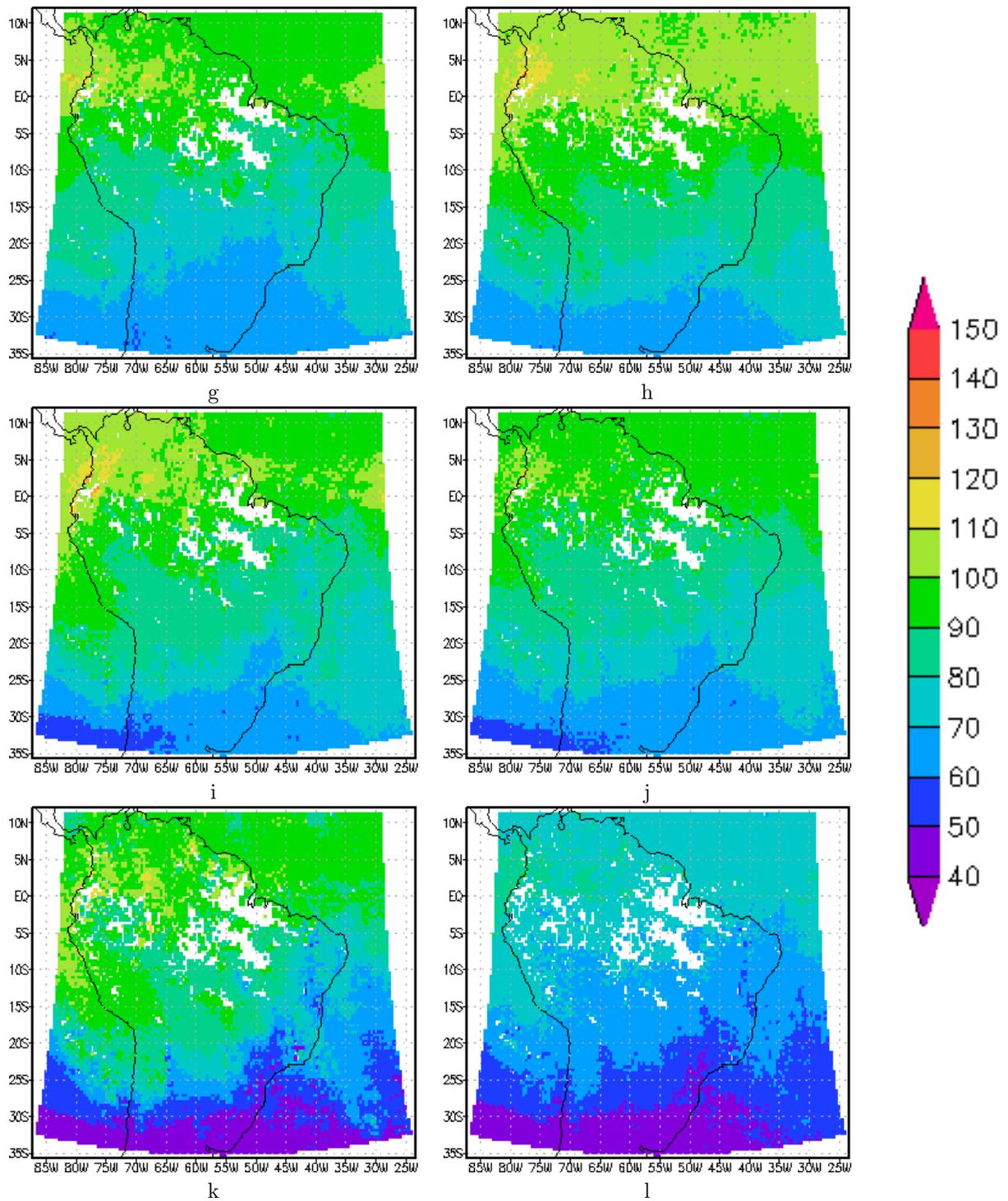


FIG. V.1.3 – Figure similaire à la figure V.1.4 pour les niveaux 350 hPa (g et h), 250 hPa (i et j) et 150 hPa (k et l).

Hormis pour les 18 et 19 Février 2004, les données de MOPITT sont disponibles sur toute la période simulée. Les produits utilisés ont une résolution journalière et couvrent 7 niveaux de pression (1000 *hPa*, 850 *hPa*, 700 *hPa*, 500 *hPa*, 350 *hPa*, 250 *hPa* et 150 *hPa*). Comme pour les produits mensuels, le premier niveau fourni comporte beaucoup d'incertitudes. C'est pourquoi nous n'utilisons que les 6 niveaux supérieurs. Nous commençons par analyser la répartition moyenne du CO sur toute la durée de la simulation pour chacun des 6 niveaux de pression retenus, puis nous affinons l'analyse grâce à une comparaison du CO moyen sur chaque niveau jour par jour. Ceci permet la caractérisation du suivi par le modèle de la variation temporelle de la quantité moyenne observée de CO.

Les moyennes temporelles par niveau de pression sont montrées sur les figures V.1.4 et V.1.5. Quel que soit le niveau de pression considéré, le modèle reproduit correctement le gradient méridien de concentration. Le modèle reproduit également l'augmentation de la concentration de CO visible au nord des Andes et au nord-est du domaine, avec toutefois une intensité moindre. Il a cependant plus de difficultés à reproduire certaines variations locales, en particulier celles visibles au-dessus du bassin amazonien. Ceci peut être en partie expliqué par l'utilisation pour la comparaison de la valeur moyenne journalière du champ de CO simulé par le modèle. La moyenne journalière a un effet de lissage sur les structures locales du champs de CO, mais elle ne permet cependant pas d'expliquer l'absence de l'augmentation moyenne de CO au dessus du bassin amazonien, peut-être due à la méthode de mesure. Au sud du domaine, en-dessous d'environ 20°S, le modèle a tendance à sur-évaluer la concentration de CO. Ceci semble trouver son explication dans la concentration initialement introduite qui est supérieure à 50 *ppbv* en-dessous de 250 *hPa*. Cette sur-évaluation a lieu principalement au-dessus des océans et peut donc également venir en partie de la méthode de mesure de MOPITT très dépendante de la température de surface (Deeters et al, 2003).

La figure V.1.6 montre l'évolution temporelle de la valeur moyenne de la concentration en monoxyde de carbone pour deux niveaux de pression de MOPITT (850 et 250 *hPa*). Le suivi des variations de la concentration moyenne est bon dans l'ensemble. A 850 et 250 *hPa*, la concentration moyenne simulée reste dans l'incertitude des mesures, comme pour les autres niveaux de pression. Les différents mécanismes modélisés de régulation de la concentration de CO (émissions, temps de vie, conditions aux limites et transport horizontal et vertical) ne fournissent pas en moyenne sur la simulation un écart significatif à la concentration moyenne introduite qui provient d'une moyenne de MOPITT sur les mois de février et de mars.

Dans l'ensemble, le modèle reproduit correctement le gradient méridien et la répartition suivant les structures météorologiques à grande échelle. La bonne reproduction du gradient méridien vient de l'initialisation et du forçage aux bords du domaine. Les sources et les puits de CO introduits dans le modèle n'ont pas modifié notablement la valeur moyenne journalière par niveau de la concentration de CO au cours de la simulation. L'évolution des champs météorologiques moyens de grande échelle sur la simulation est bonne dans le modèle, la forme et la localisation des structures de grande échelle observées par MOPITT étant reproduites par le modèle, avec toutefois une exception pour l'altitude atteinte par l'augmentation de la concentration au nord des Andes et l'absence d'augmentation au-dessus du bassin amazonien. Les variations journalières sont également reproduites et la concentration de CO simulée reste dans les incertitudes de MOPITT.

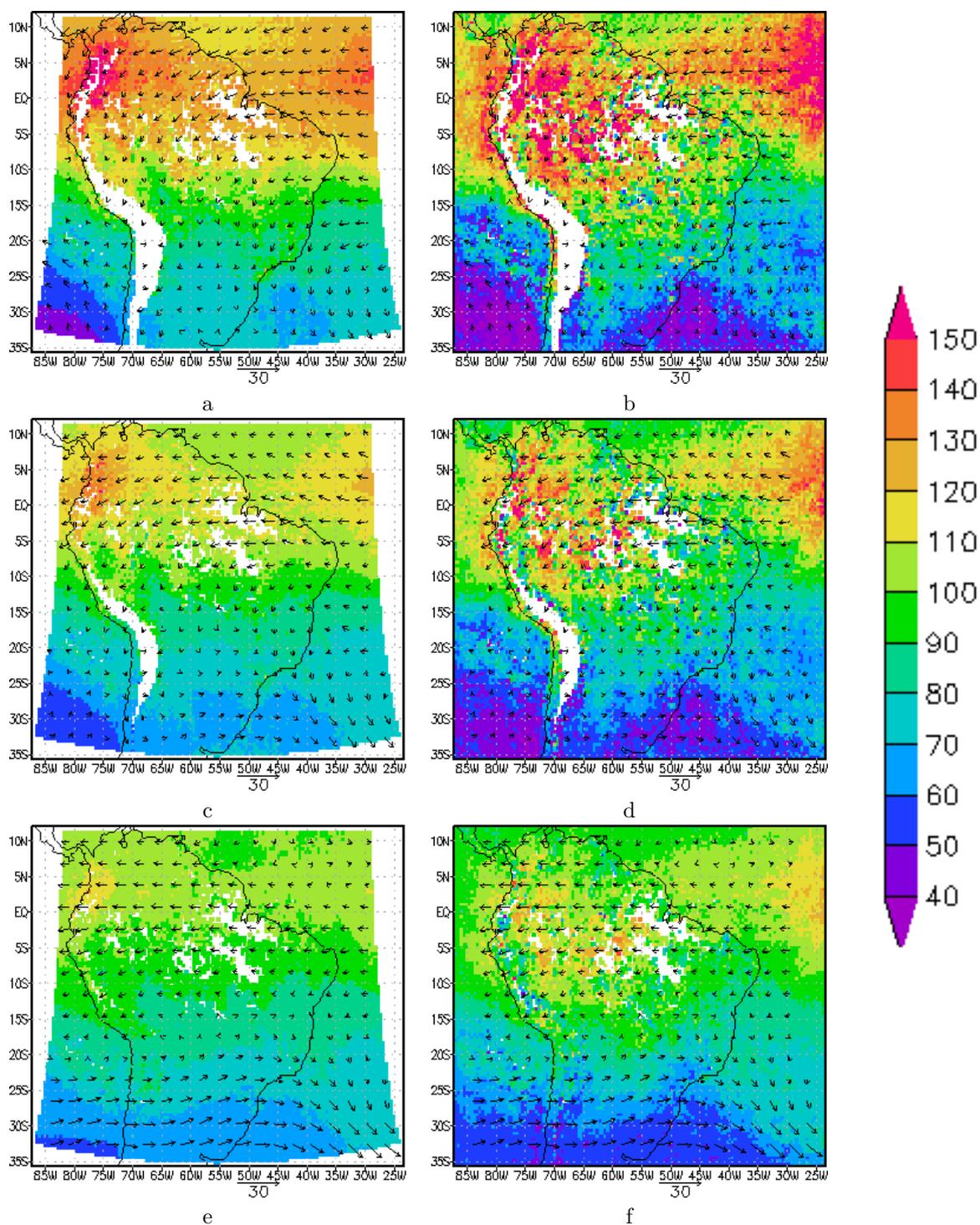


FIG. V.1.4 – Champs de CO moyens sur la simulation du 11 février au 16 mars (colonne de gauche) et champs moyens correspondant extraits de MOPITT (colonne de droite) pour les niveaux 850 hPa (a et b), 700 hPa (c et d) et 500 hPa (e et f).

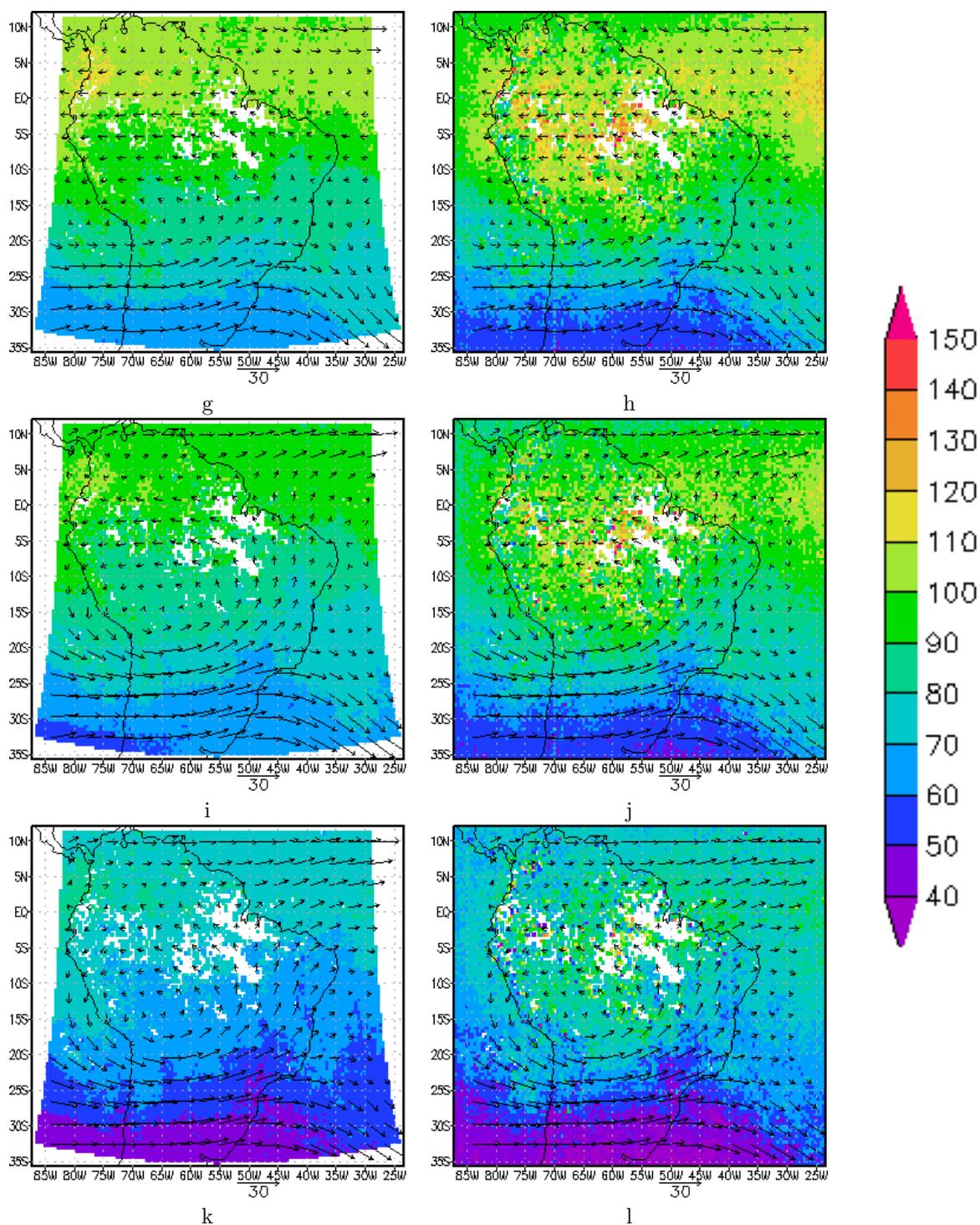


FIG. V.1.5 – Figure similaire à la figure V.1.4 pour les niveaux 350 hPa (g et h), 250 hPa (i et j) et 150 hPa (k et l).

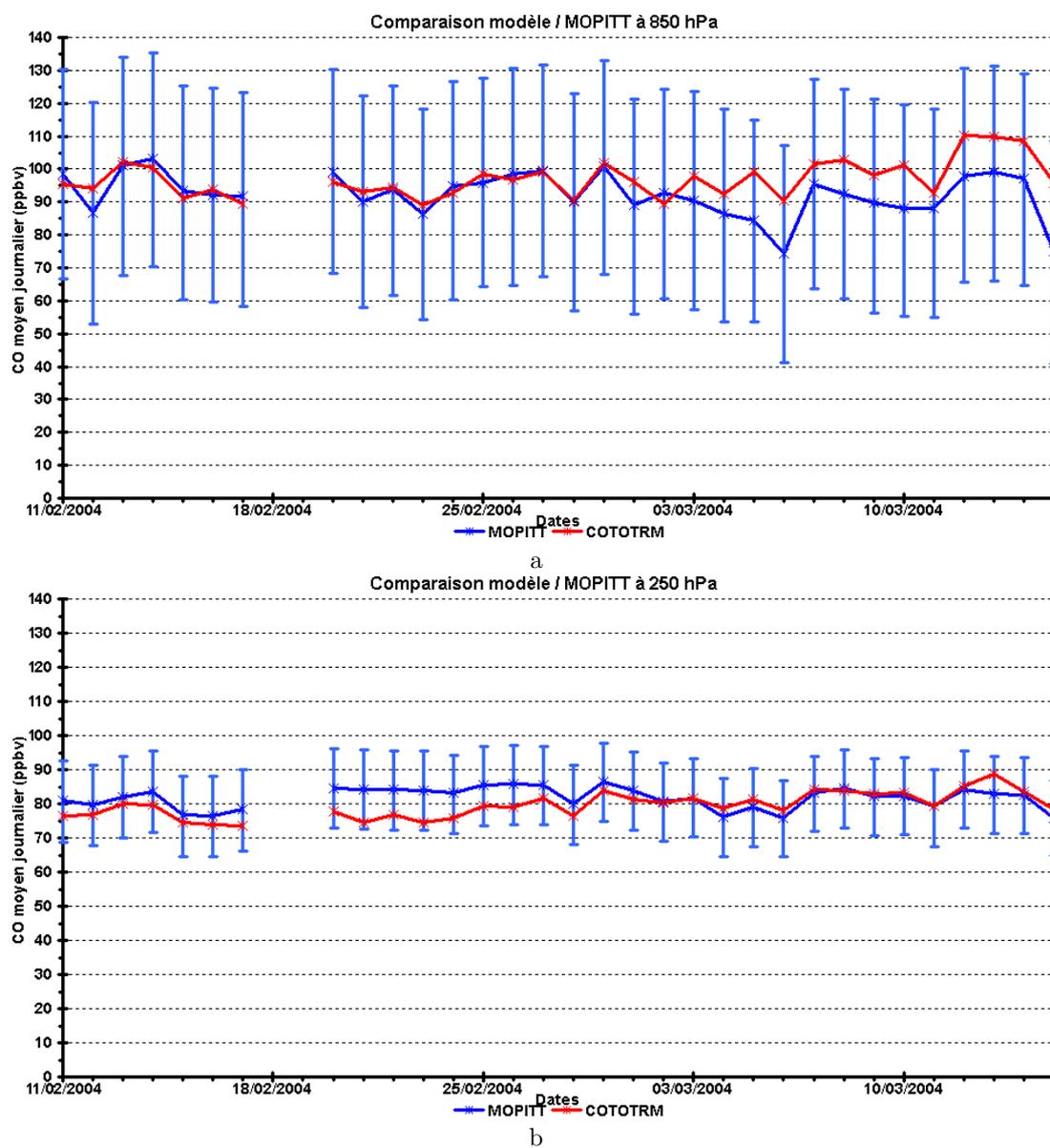


FIG. V.1.6 – Comparaison des moyennes journalières issues des données de MOPITT (en bleu) et de la simulation (en rouge) à 850 hPa (a) et 250 hPa (b).

### V.1.3 Comparaison aux mesures aéroportées

Afin de compléter la comparaison aux données de MOPITT, nous comparons les résultats du modèle avec les mesures aéroportées de manière similaire à celle utilisée pour les champs météorologiques. Nous comparons d'abord le profil moyen et l'écart-type associé sur l'ensemble des vols et les biais moyens, ainsi que la corrélation pour chacun des niveaux verticaux, puis nous comparons les profils verticaux individuels et enfin les résultats de la simulation avec chacun des vols.

La figure V.1.7 montre le profil moyen simulé et le profil moyen mesuré, la moyenne étant faite sur tous les vols en conservant tous les points de mesure. La forme du profil simulé est globalement en accord avec le profil issu des mesures. La corrélation entre le profil moyen simulé et le profil moyen mesuré est de 0.7. Le modèle sur-évalue fortement la concentration dans les basses couches et moins fortement la concentration jusqu'à 9 km environ. Au dessus, la concentration simulée est sous-évaluée. Le biais dans la moyenne troposphère est positif et d'environ 10 ppbv. Le biais en-dessous de 2 km est beaucoup plus élevé, pouvant atteindre environ 30 ppbv. Le biais positif en dessous de 2 km peut provenir des émissions et/ou de la paramétrisation de la convection qui n'emporterait pas assez de CO et/ou de la représentation de la couche limite. Sa hauteur est diagnostiquée dans la paramétrisation de la convection restreinte pour déterminer la base des nuages. Ce diagnostic repose sur la TKE et sur le rapport de mélange en eau liquide. La paramétrisation de la convection profonde n'utilise pas ce diagnostic. Le biais négatif au dessus de 9 km peut avoir pour origine :

- un biais dans le transport convectif paramétrisé dans le modèle (pas assez de CO transporté dans la haute troposphère),
- un biais dans la restitution des vols simulés à cause, par exemple, d'une incertitude dans la localisation spatio-temporelle des ascendances convectives,
- une concentration initiale trop faible dans la haute troposphère.

Ces possibilités sont étudiées de manière plus détaillée dans la suite.

La figure V.1.8 permet de comparer le profil issu des mesures du Falcon, celui issu du modèle sur les points échantillonnés par le Falcon, le profil vertical moyen sur la grille 2 au début de la période de spinup (en jaune sur la figure) et en moyenne sur la simulation sur la grille 2 (en vert sur la figure). La comparaison entre les profils sur tous les vols simulés (en rouge sur la figure) et sur toute la simulation sur la grille 2 montre que l'échantillonnage du Falcon influence beaucoup la forme du profil. Le profil moyen sur la simulation sur la grille 2 est moins caractéristique de masses d'air influencées par la convection que le profil obtenu le long des vols du Falcon : la forme en C est nettement moins marquée. En particulier, la concentration atteinte dans les basses couches est inférieure à celle obtenue avec tous les vols simulés. Cela montre que les mesures effectuées dans les basses couches sont fortement influencées par la présence à proximité d'une source importante de pollution. Enfin, il est intéressant de remarquer que la répartition verticale du CO évolue fortement entre le début du spinup et pendant la simulation. Le modèle redistribue de manière plus réaliste le CO introduit initialement qui provenait des données de MOPITT.

La figure V.1.9 montre la corrélation niveau par niveau. Celle-ci est bonne en-dessous de 1 km et entre 5 et 12 km. Elle n'est pas bonne entre 1 et 5 km et à partir de 12.5 km. L'étude des valeurs moyennes par vol et par altitude montre que la baisse de la corrélation entre 3 et 4 km correspond d'une part à un manque de variabilité des valeurs simulées par rapport aux observations. La

concentration simulée reste en effet entre 71 et 90 ppbv tandis que la concentration mesurée varie entre environ 48 et 97 ppbv, ce qui se voit sur la figure V.1.7 (a). D'autre part, l'évolution de la concentration à 4 km est différente entre le modèle et les mesures. Comme lors de l'analyse des résultats météorologiques, les altitudes où se produisent de fortes baisses de la corrélation correspondent à des altitudes proches des niveaux préférentiels de la paramétrisation de la convection.

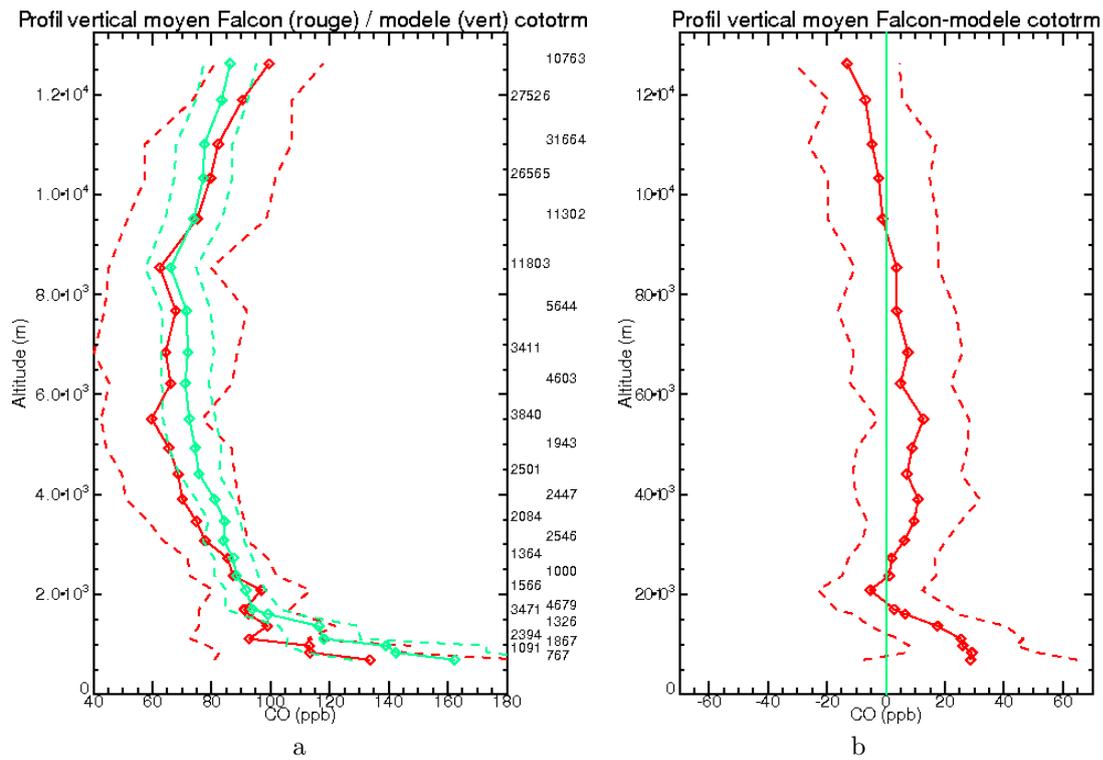


FIG. V.1.7 – Profils moyens simulé (en vert) et observé (en rouge) plus ou moins l'écart-type (pointillets) pour la simulation de référence.

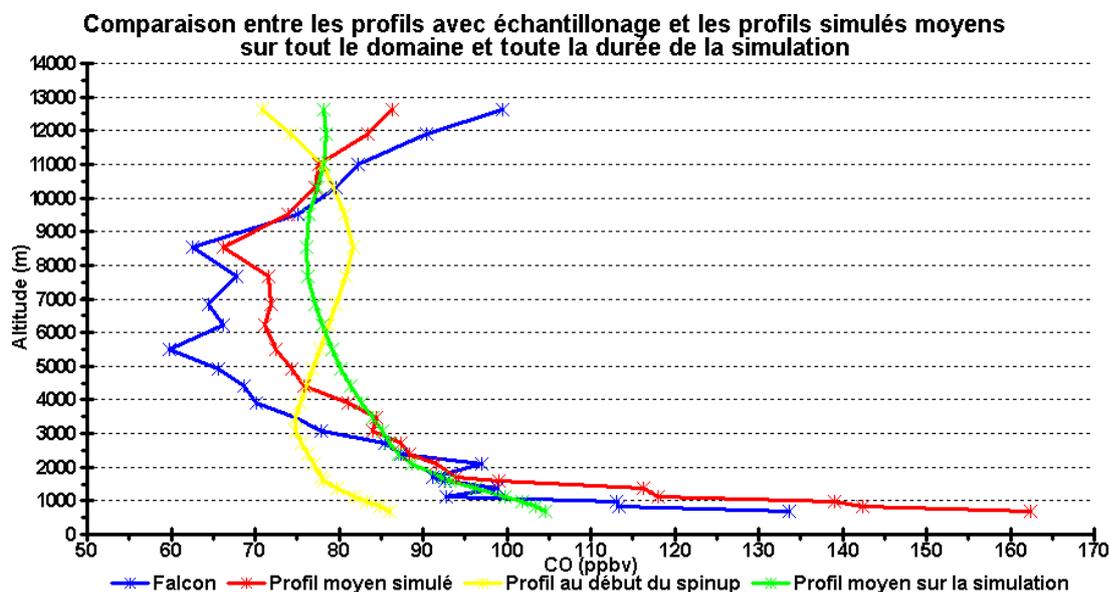


FIG. V.1.8 – Profils moyens issus des mesures du Falcon (en bleu), du modèle avec l'échantillonnage du Falcon (en rouge), sur toute la grille 2 au début de la période de spinup (en jaune) et sur toute la simulation sur la grille 2 (en vert).

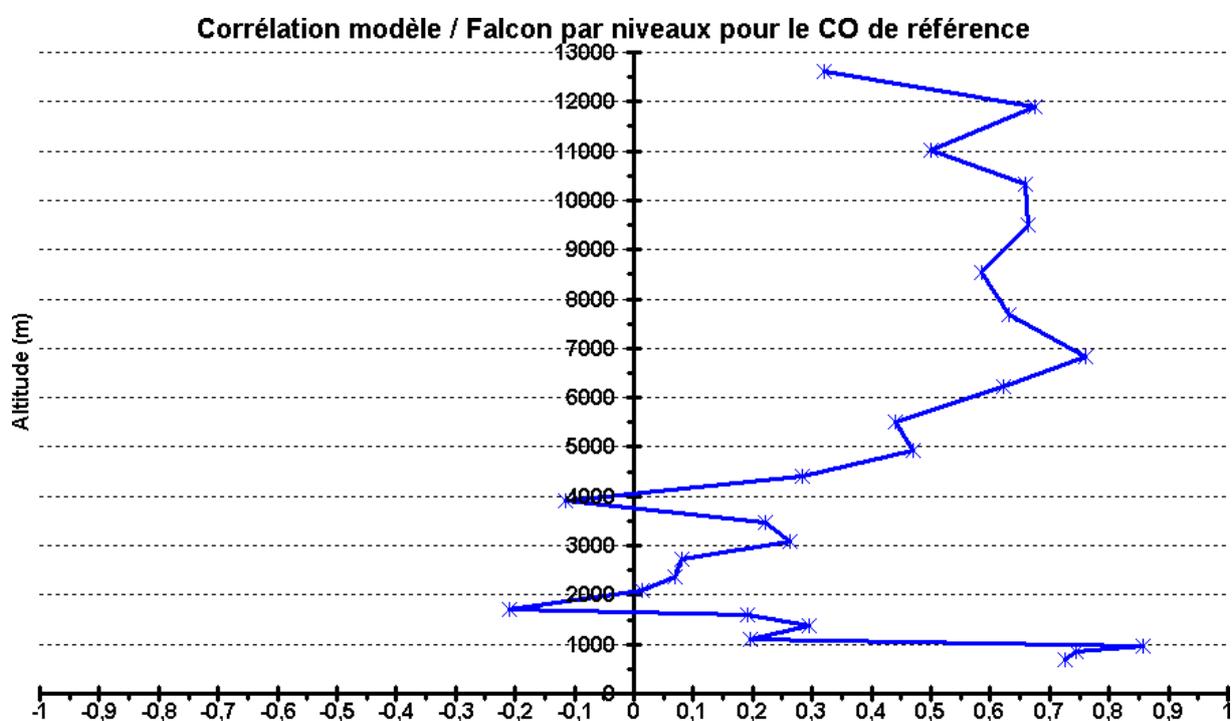


FIG. V.1.9 – Corrélation sur les niveaux du modèle entre le CO de la simulation de référence et les données du Falcon. L'indice de corrélation est donné en abscisse.

La figure V.1.10 (a) montre l'erreur quadratique moyenne pour le monoxyde de carbone, ainsi que les erreurs quadratiques moyennes systématiques et aléatoires. La part aléatoire de l'erreur quadratique moyenne est un peu plus importante en dessous de 2 km que sur le reste du profil, mais dans l'ensemble, c'est la part systématique qui domine dans l'erreur quadratique moyenne. L'erreur quadratique moyenne et ses parts systématiques et aléatoires se stabilisent à peu près à partir d'environ 4 km. Cela vient vraisemblablement de l'initialisation, des sources ou du transport, car un effet de la différence entre la résolution de la grille et la résolution des données aboutirait à une erreur plutôt aléatoire, car liée à l'aspect très local des mesures effectuées, comme pour la direction du vent. Bien que les tests de sensibilité concernant l'initialisation soient discutés plus loin, la simulation dans laquelle le CO est traité similairement à Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007) permet de faire la distinction entre une erreur due à l'initialisation et une erreur due au transport. En effet, dans cette simulation, la concentration initiale de CO au début du spinup est nulle. On ajoute ensuite la valeur de fond (60 ppbv) sur tout le domaine lors du post-traitement. La figure V.1.10 (b) montre les erreurs quadratiques moyenne, aléatoire et systématique pour le CO traité similairement à Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007). La part aléatoire de l'erreur reste relativement proche de la part systématique jusqu'à environ 2.5 km par rapport à la simulation de référence, mais suit globalement les mêmes variations. L'erreur quadratique en dessous de 2.5 km provient donc en grande partie de la différence de résolution entre le modèle et les observations. Au dessus de 3 km environ, l'erreur quadratique est principalement systématique, comme pour la simulation de référence. Ces résultats indiquent d'une part que l'erreur systématique dans la simulation de référence qui domine en dessous de 2 km provient de l'initialisation. D'autre part, l'erreur systématique qui est dominante au dessus de 4 km, commune aux deux simulations, provient principalement des sources et/ou du transport, la simulation avec initialisation nulle semblant indiquer préférentiellement un biais dans le transport convectif.

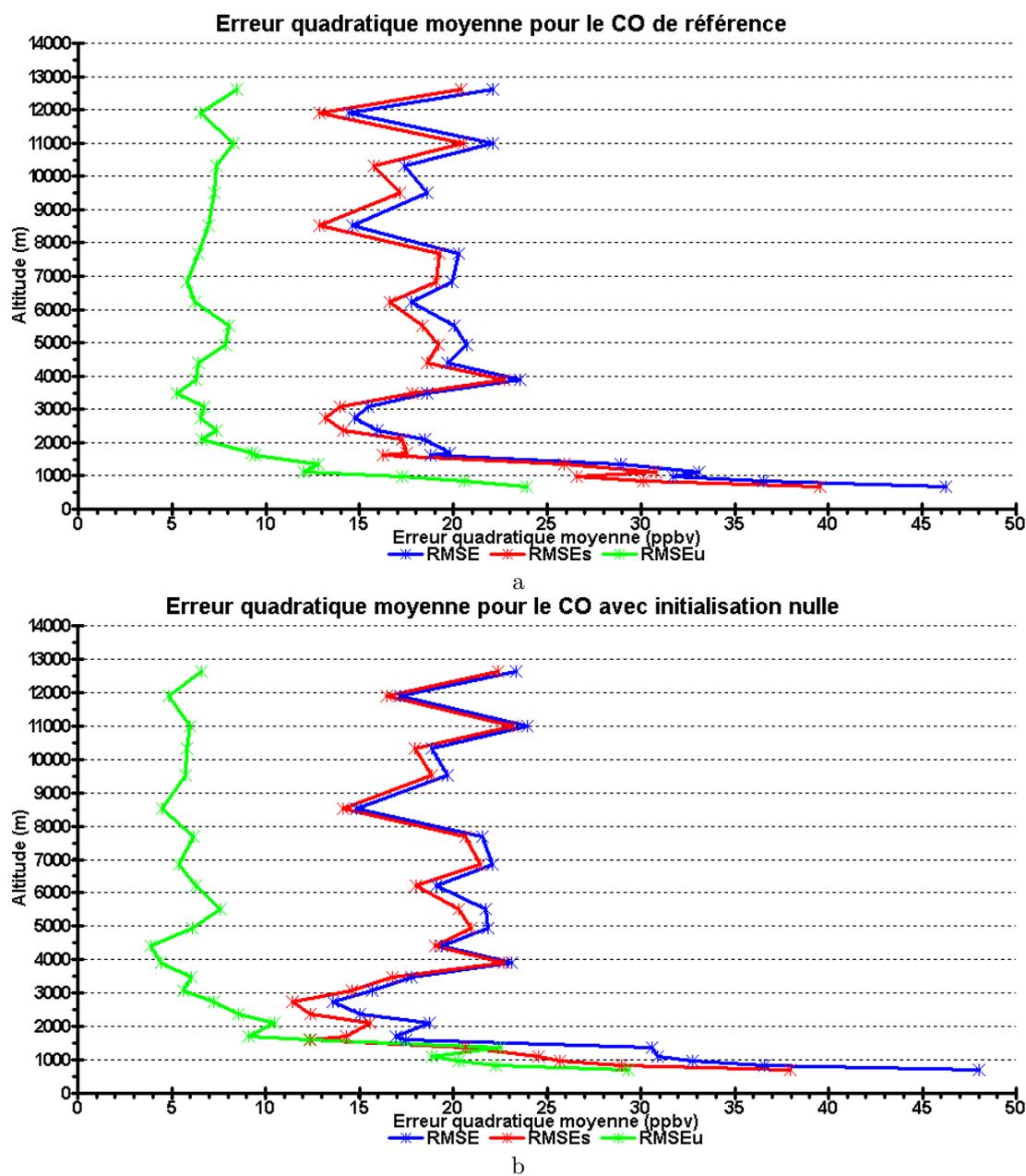


FIG. V.1.10 – Erreur quadratique moyenne (RMSE), systématique (RMSEs) et aléatoire (RMSEu) pour le CO de la simulation de référence (a) et pour le CO similaire à la démarche utilisée en opérationnel (b).

La figure V.1.11 montre les profils individuels produits à partir des données de chaque vol. On peut voir que la structure verticale moyenne est globalement suivie par le modèle. La sur-estimation de la concentration en dessous de 2 km est présente sur l'ensemble des vols, avec souvent une baisse importante de la concentration très localisée verticalement autour de 1.5 km d'altitude. Les mesures à basse altitude sont effectuées pour la plupart près de sources anthropiques dans la région de São Paulo. Cependant, l'analyse des champs horizontaux à ces altitudes indique que les zones de forte concentration sont relativement étendues dans la plupart des cas. Deux causes à la sur-estimation de la concentration en dessous de 2 km peuvent être avancées : une sur-estimation des émissions et/ou des incertitudes dans la représentation de la couche limite et/ou dans son diagnostic, qui donnerait une altitude de départ trop haute pour la convection, maintenant ainsi préférentiellement les émissions dans les basses couches. Pour la moyenne et haute troposphère, on remarque que les faibles concentrations mesurées (inférieures à 50 ppbv) ne sont pas atteintes par le modèle (vols 7, 8, 12 et 13). Ceci vient vraisemblablement de l'initialisation issue des données de MOPITT. Les valeurs de la concentration initiale dans le modèle aux altitudes échantillonnées par le Falcon sont supérieures à 40 à 50 ppbv, ne permettant donc pas de reproduire les faibles valeurs mesurées. Certains vols simulés montrent une sur-évaluation forte de la concentration de CO autour de 4 à 5 km (figures V.1.11 c, d, m et n). La concentration à ces altitudes est fortement influencée par la convection restreinte. La paramétrisation de la convection restreinte peut donc vraisemblablement être la cause de ces sur-estimations, avec vraisemblablement une participation de la paramétrisation de la convection profonde qui ne peut démarrer au-dessus de 4 km et dans laquelle il n'y a pas de mélange avec l'environnement le long de la colonne convective.

Que ce soit pour les profils individuels ou le profil moyen, les écart-types des mesures et des valeurs simulées sont très différents. Le modèle s'écarte peu de la valeur moyenne tandis que les mesures ont une variabilité importante. Ceci peut en partie s'expliquer par les différences de résolution entre les observations et le modèle : les observations ont une résolution spatio-temporelle fine, tandis que le modèle a une résolution plus grossière horizontalement et verticalement, en particulier à partir de 9 km où la résolution verticale atteint 900 m. De plus, comme cela a été précisé, la diffusion pour le CO a été remise au même niveau que celle utilisée pour les autres grandeurs scalaires dans notre simulation alors qu'elle est plus faible dans la version opérationnelle du CATT-BRAMS. Ceci atténue plus rapidement les structures locales.

Les comparaisons directes aux mesures acquises lors des vols avion sont montrées sur la figure V.1.12. En premier lieu, on constate que le niveau moyen de la concentration de CO sur les paliers effectués en altitude (10 à 12 km environ) fluctue moins dans les champs simulés que dans les observations. La concentration simulée le long de ces paliers varie entre environ 60 et 90 ppbv, tandis que la concentration mesurée le long de ces mêmes paliers varie entre environ 40 et 105 ppbv. La sous-estimation générale par le modèle des fortes concentrations mesurées peut provenir de la résolution, de l'initialisation ou d'une sous-estimation dans le transport convectif. Il est à noter que les fluctuations des valeurs moyennes sur les paliers les plus hauts d'un vol à l'autre correspondent aux variations de la distribution à grande échelle de CO à ces altitudes. L'allure générale de la concentration mesurée au cours des vols avion est généralement peu suivie par le modèle. Le coefficient de corrélation moyen sur tous les vols est d'environ 0.5. Le tableau V.1.1 donne les biais moyens (MBE) et les biais en valeur absolue moyens (MAE) pour chaque vol. Le biais moyen indique des écarts allant de -15 ppbv environ à 21 ppbv. Pour chaque vol, le biais en valeur absolu

moyen est plus élevé que la valeur absolue des biais moyens, indiquant une compensation dans les biais et un écart moyen en valeur absolue entre la concentration simulée et la concentration observée d'environ 15 *ppbv*. L'accord entre les concentrations simulée et observée est donc bon à environ 20% près.

Pour la plupart des vols, on note l'absence de plusieurs structures de taille relativement importante (vols 1, début du vol 8, 9 ou 13 par exemple). A l'inverse, des structures de plus faible extension spatio-temporelle sont présentes (vols 2, 6 ou fin du vol 8 par exemple), indiquant que le modèle est capable de simuler des structures relativement fines. Deux vols seront analysés plus en détails dans la suite afin d'apporter plus d'explications sur le comportement du modèle dans différentes situations. On peut ici avancer plusieurs hypothèses. De manière générale, le modèle ne déclenche pas toujours au bon endroit et/ou au bon moment la convection par rapport aux observations. Cela tient en partie au fait que la localisation de la convection dans le modèle est précise à quelques points de grille et à quelques pas de temps près. Sur la grille 2, la résolution est de 12.5 *km*, tandis que sur la grille 1, la résolution est de 50 *km*. Cela pourrait expliquer l'absence de certaines structures de taille importante si le phénomène convectif qui permet le soulèvement du CO dans la haute troposphère est déclenché sur la grille 1. De plus, la sensibilité à l'orographie de la paramétrisation de la convection peut augmenter l'incertitude dans la localisation de la convection. L'altitude des paliers peut également intervenir. On peut en effet voir sur le vol 8 que la structure visible dans la concentration mesurée à environ 63000 *s* mais absente dans le vol simulé est située sur un palier à environ 10500 *m*, tandis que les structures plus fines mesurées et simulées à environ 70500 *s* le sont sur un palier à environ 12000 *m*. L'incertitude sur l'altitude ou la gamme d'altitudes affectée par la convection pourrait donc également expliquer l'absence de certaines structures de grande extension. Enfin, on peut également mettre en avant l'effet des concentrations disponibles dans les basses couches et en altitude. Si la concentration dans les basses couches est similaire à la concentration en altitude, bien que possiblement présent, le phénomène convectif ne sera pas visible, la quantité de CO emportée ne se distinguant pas de la quantité déjà présente en altitude.

Les comparaisons entre le modèle et les données vol par vol et profil vertical par profil vertical montrent que le modèle reproduit mieux la répartition verticale moyenne que la répartition le long des vols. La variabilité des concentrations simulées est beaucoup plus faible que celle des concentrations mesurées, ce qui s'explique en partie par l'initialisation à partir des données de MOPITT et par les différences de résolution entre les concentrations simulées et les mesures. Mais ce ne sont vraisemblablement pas les seules explications, comme le montrent certains vols simulés. La corrélation entre le modèle et les données sur chaque niveau vertical est mauvaise aux environs de 4 *km*, comme pour certains champs météorologiques (température et vent). Cette baisse de la corrélation indique que l'initialisation n'est pas seule en cause. Cela est confirmé par la comparaison des erreurs quadratiques moyennes, systématiques et aléatoires entre la simulation de référence et la simulation dans laquelle le CO a une initialisation nulle comme celle utilisée par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007). Dans les deux cas, la part des erreurs qui domine largement au dessus de 4 *km* est la part systématique. Cette contribution forte de l'erreur systématique à l'erreur quadratique montre que le biais observé provient vraisemblablement des sources et/ou du transport.

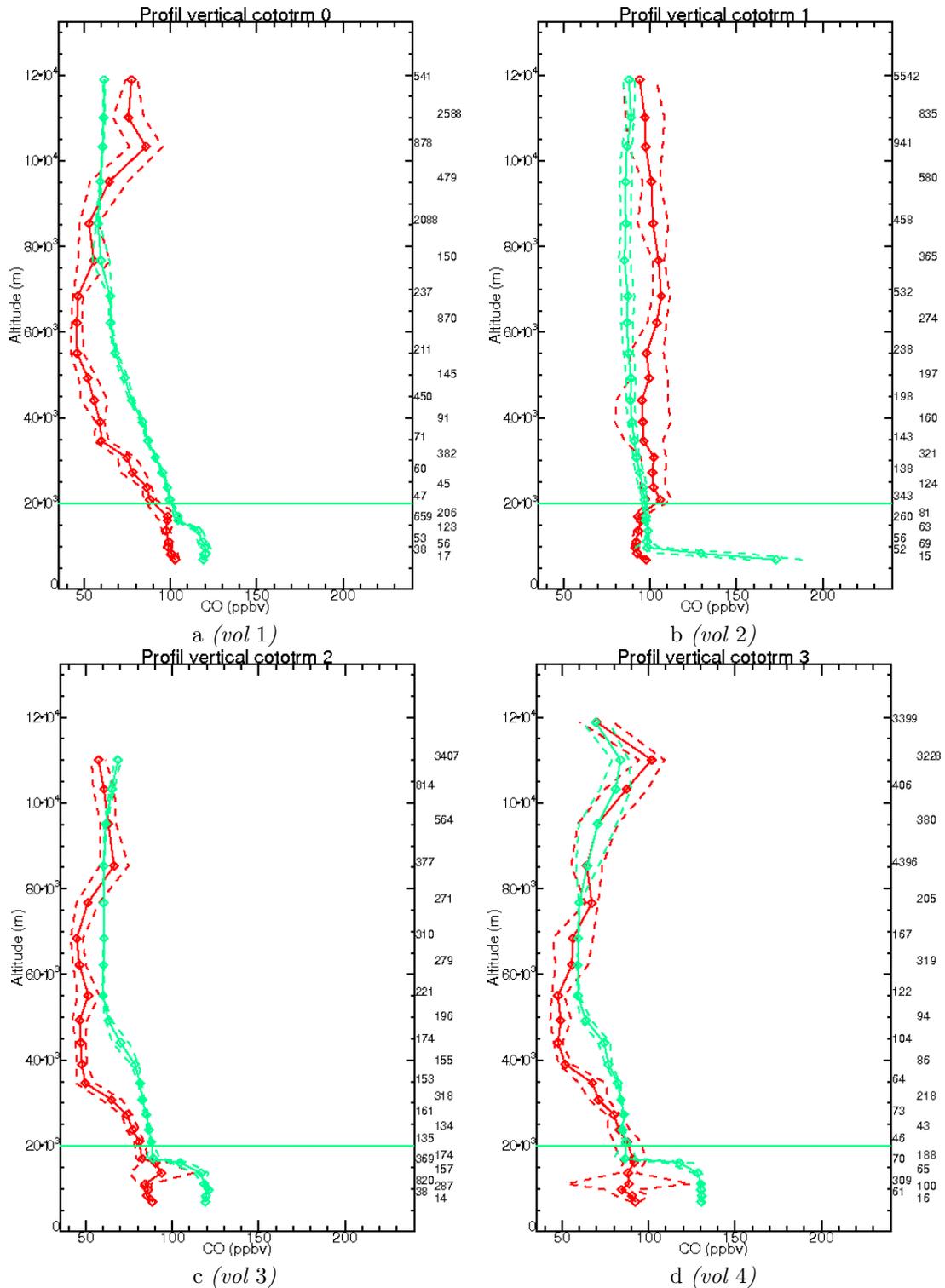
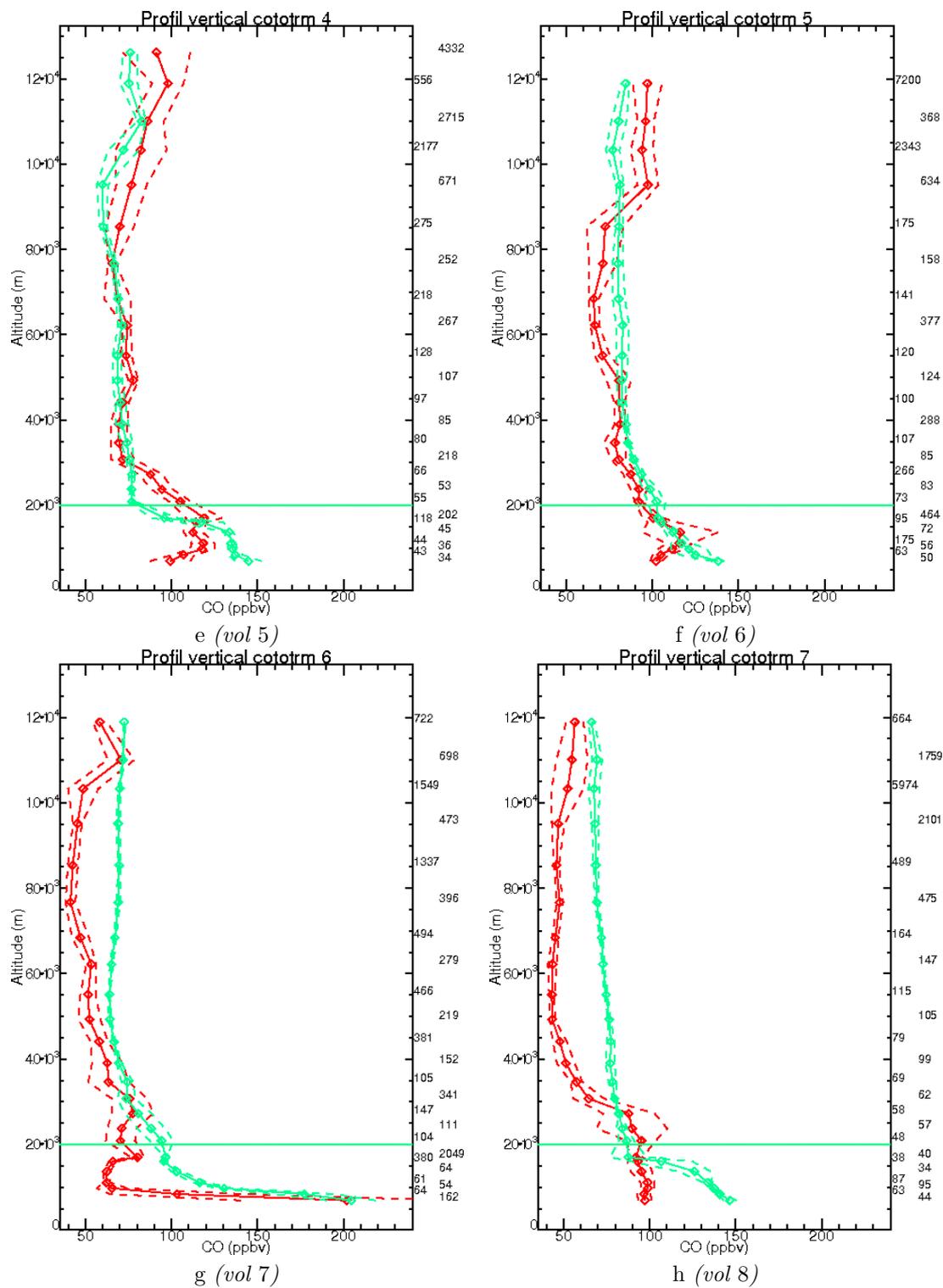
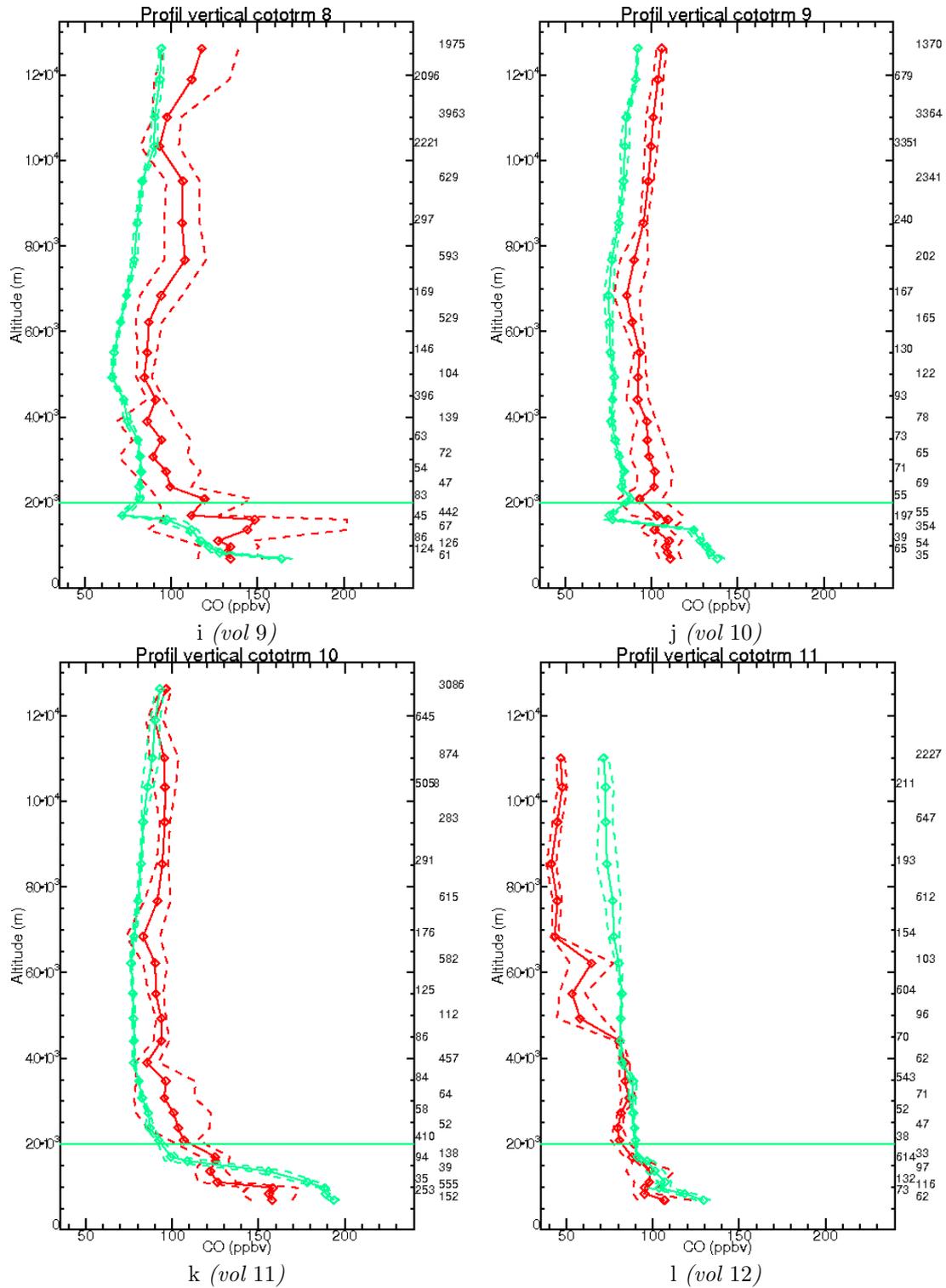


FIG. V.1.11 – Profils verticaux moyens de CO vol par vol. Les profils issus des mesures sont en rouge et ceux issus de la simulation sont en vert. Les pointillots correspondent à la valeur moyenne plus ou moins l'écart-type. La concentration de CO est donnée en abscisse et varie de 35 à 240 ppbv. L'altitude est donnée en ordonnée et varie de 0 à 13500 m au dessus du niveau de la mer.





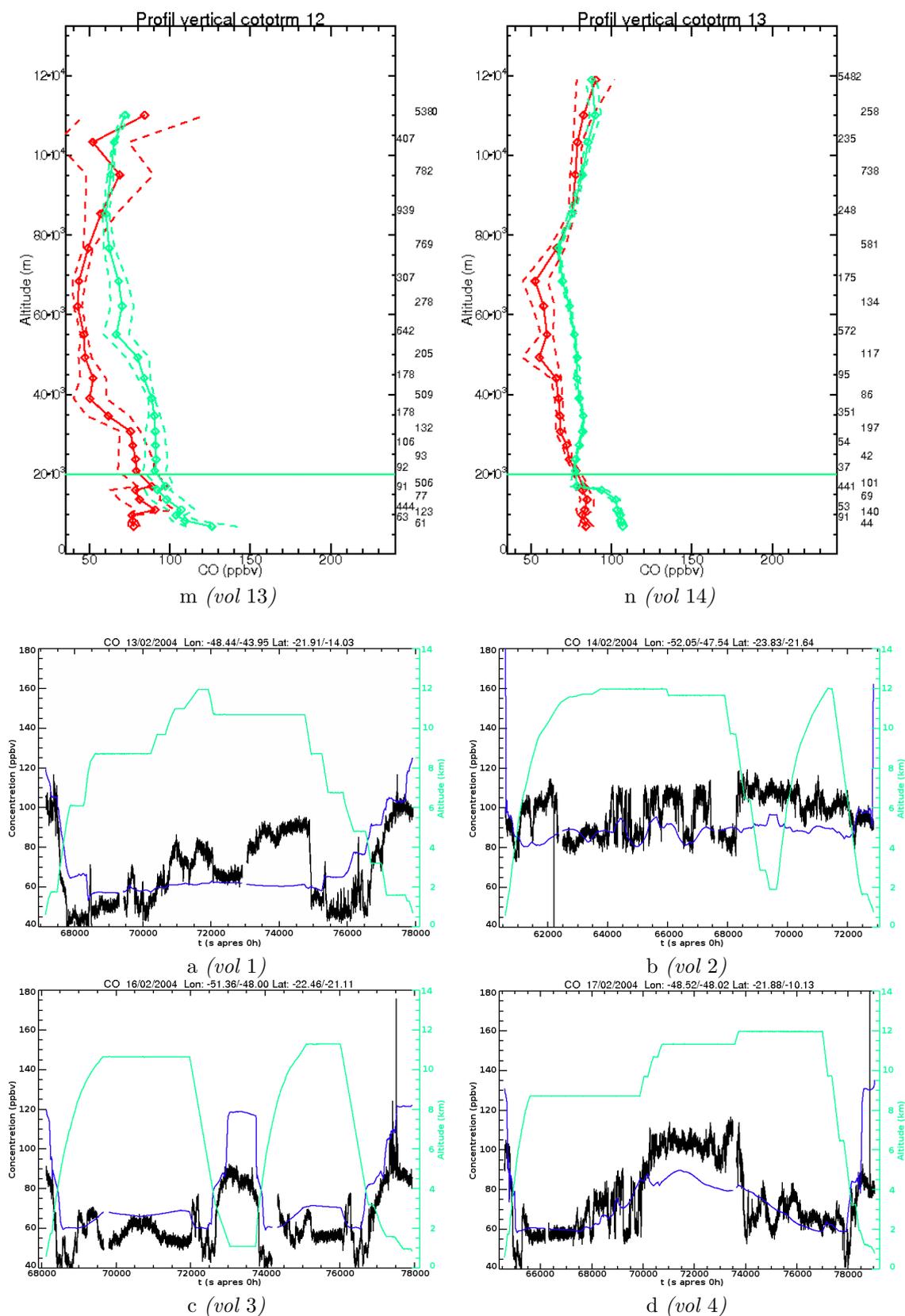
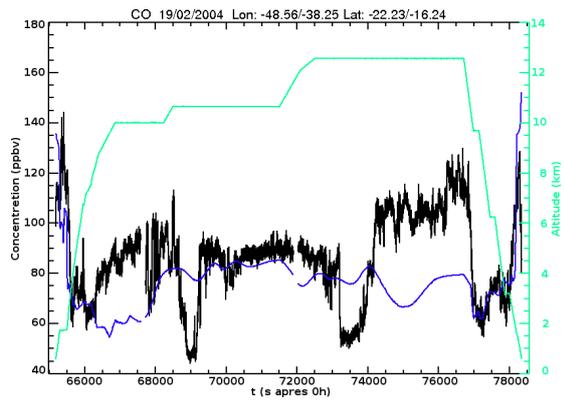
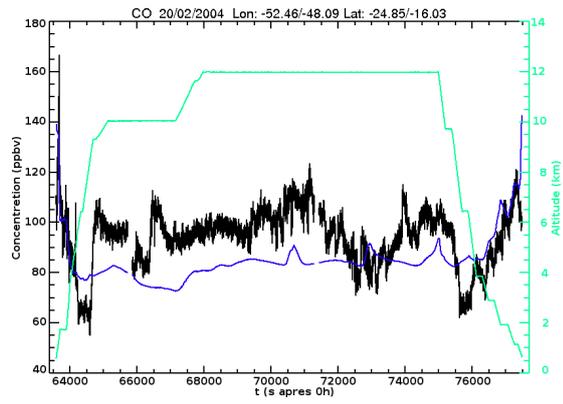


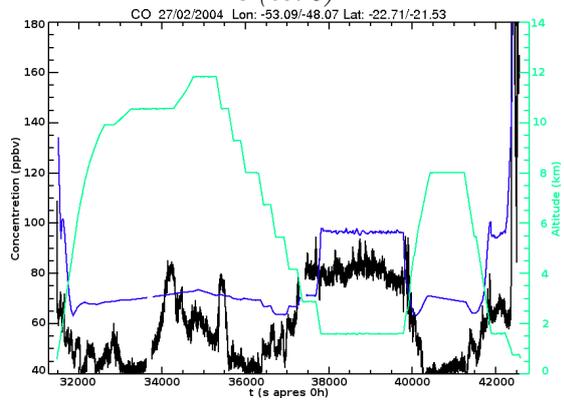
FIG. V.1.12 – Concentration de CO (ppbv) vol par vol en fonction du temps TU en s. La courbe verte indique l'altitude (en mètres), la courbe bleue correspond au vol simulé et la courbe noire aux mesures. La concentration de CO est donnée en ordonnée à gauche et varie de 40 à 180 ppbv.



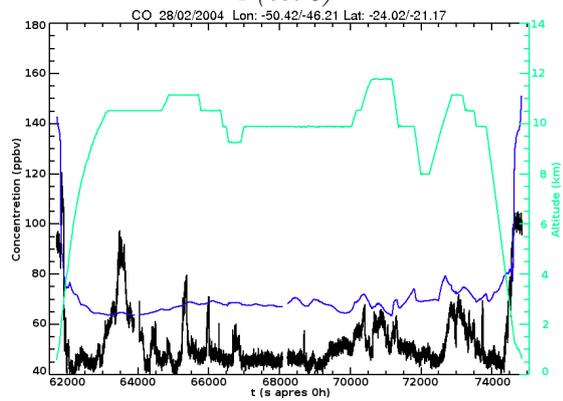
e (vol 5)



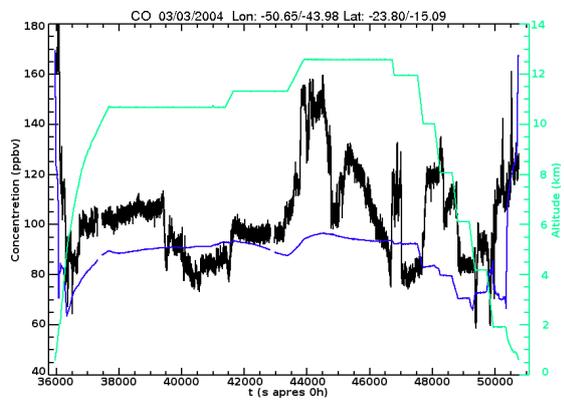
f (vol 6)



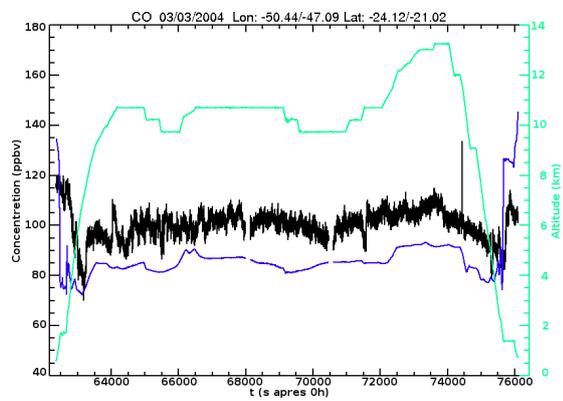
g (vol 7)



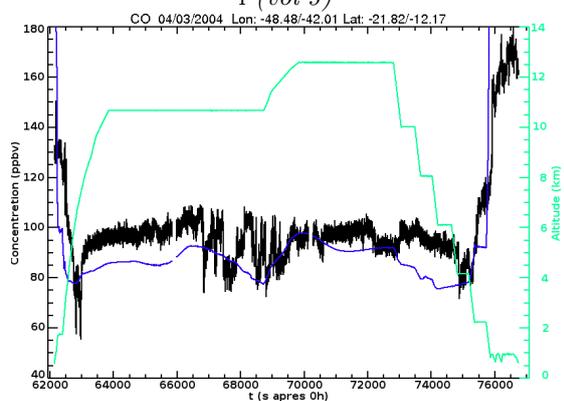
h (vol 8)



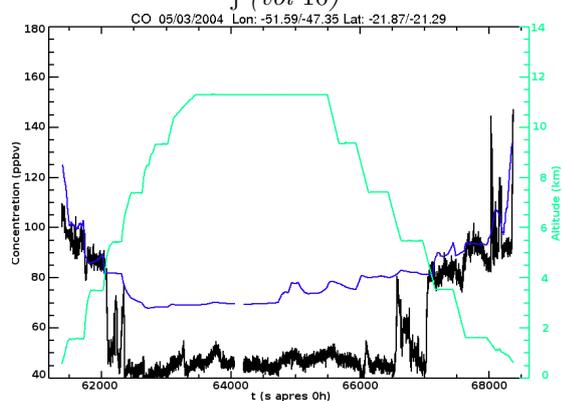
i (vol 9)



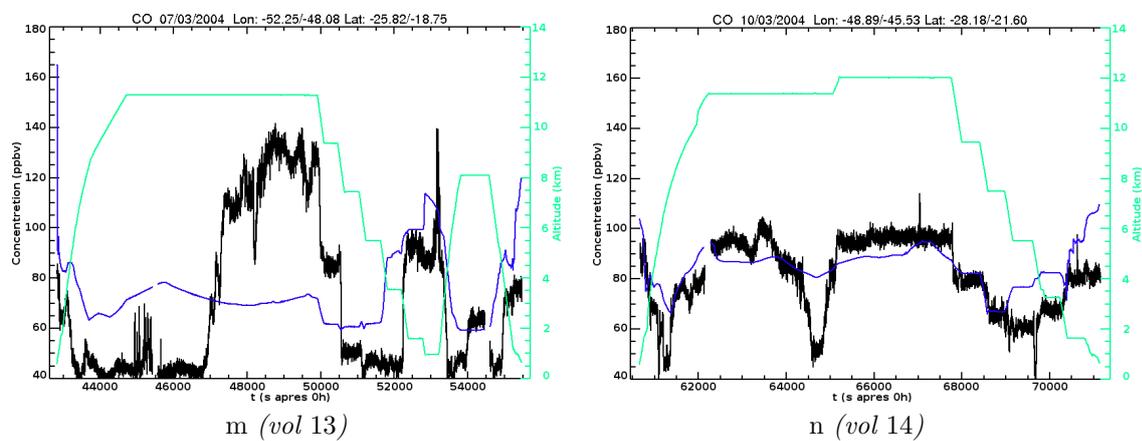
j (vol 10)



k (vol 11)



l (vol 12)



N° de vol	MBE (ppbv)	MAE (ppbv)
1	0,35	14,17
2	-8,28	11,42
3	13,49	14,74
4	-1,74	11,58
5	-9,80	16,21
6	-9,1	13,58
7	17,82	19,81
8	17,52	18,82
9	-14,85	18,2
10	-13,59	15,51
11	-5,61	11,39
12	20,87	21,30
13	3,35	28,11
14	3,45	9,06

TAB. V.1.1 – MBE et MAE (en ppbv) pour le CO de référence et pour chaque vol.

### V.1.4 Etude de deux vols

Afin d'apporter plus de précision sur le comportement du modèle, deux vols sont analysés plus en détails. Nous avons choisi le vol 8 car certaines variations mesurées sont présentes dans le vol simulé, tandis que d'autres non. Nous avons également choisi le vol 13 car une très forte augmentation sur une durée importante n'apparaît pas dans le vol simulé.

#### Analyse du vol 8

Ce vol a été effectué le 28 février 2004. La description de ce vol par Huntrieser *et al.* (2007) indique que la SACZ était localisée à plus de 500 km vers le nord-est du centre d'opération. Les vents horizontaux mesurés dans la haute troposphère avaient une vitesse située entre 20 et 30 m/s et venaient du sud-ouest. Ils étaient influencés par le jet subtropical. La faible concentration de CO mesurée dans la moyenne troposphère est due à l'origine subtropicale de la masse d'air échantillonnée. Au sein de cette masse d'air, une cellule convective isolée d'un diamètre estimé entre 20 et 30 km s'est développée. L'enclume de cette cellule a été échantillonnée par le Falcon lors de trois pénétrations, visibles par trois augmentations des concentrations de CO et de  $NO_x$  autour de 66000 s (figure V.1.12 h pour le CO, figure 6 a dans Huntrieser *et al.* 2007 pour le CO et les  $NO_x$ ). Dans le vol simulé, ces augmentations ne sont pas visibles, ni l'augmentation importante présente un peu plus tôt dans le vol. A l'inverse, vers 70500 s, des structures relativement fines sont présentes dans les mesures et dans le vol simulé. Pour ce vol, l'investigation de l'origine de l'absence ou de la présence des structures observées dans les vols simulés est menée grâce aux données de taux précipitants accumulés et à l'aide des champs météorologiques et de CO simulés.

La figures V.1.13 montre les taux précipitants accumulés simulés et observés pour la journée du 28 février 2004. De fortes différences sont visibles entre le modèle et les observations. Les précipitations simulées au dessus du continent sont très faibles par rapport aux observations. La convection semble donc être statistiquement faible sur ce domaine dans le modèle lors de cette journée. L'analyse des champs horizontaux de CO issu du modèle aux environs des heures durant lesquelles le vol a eu lieu et à l'altitude du palier (environ 11 km) montre malgré cela des augmentations très locales en espace et en temps de CO dues à la convection profonde paramétrisée. L'une de ces structures, isolée, passe relativement près de la partie de la trajectoire avion où la cellule isolée a été échantillonnée (figure V.1.14 d, à environ -21.5°N et -47°E). Elle semble correspondre du point de vu temporel, mais est décalée spatialement. A 20 UTC (figure V.1.14 f), les augmentations locales de la concentration de CO semblent bien localisées spatialement et temporellement au niveau montré sur la figure et sur le niveau supérieur (non montré). En effet, l'augmentation de la concentration dans les mesures par rapport à la concentration de fond mesurée est plus forte en relatif que dans le vol simulé. Or le vol simulé « frôle » les cellules convectives. Il est probable que le Falcon soit passé plus près de ces cellules et que celles-ci soit donc légèrement décalées dans la simulation. Entre les deux évènements, les diamètres des augmentations paraissent légèrement différentes (la cellule isolée possède un diamètre légèrement supérieur). Mais la différence majeure est le nombre de cellules, visibles par les augmentations locales de CO proches les unes des autres et sur quelques heures. Le vol simulé a en effet plus de chances de sonder des masses d'air de concentration plus élevée en CO si plusieurs cellules se sont développées, même si celles-ci sont un peu décalées en espace et/ou en temps, que s'il s'agit d'une cellule isolée, expliquant ainsi les différences observées le long du vol.

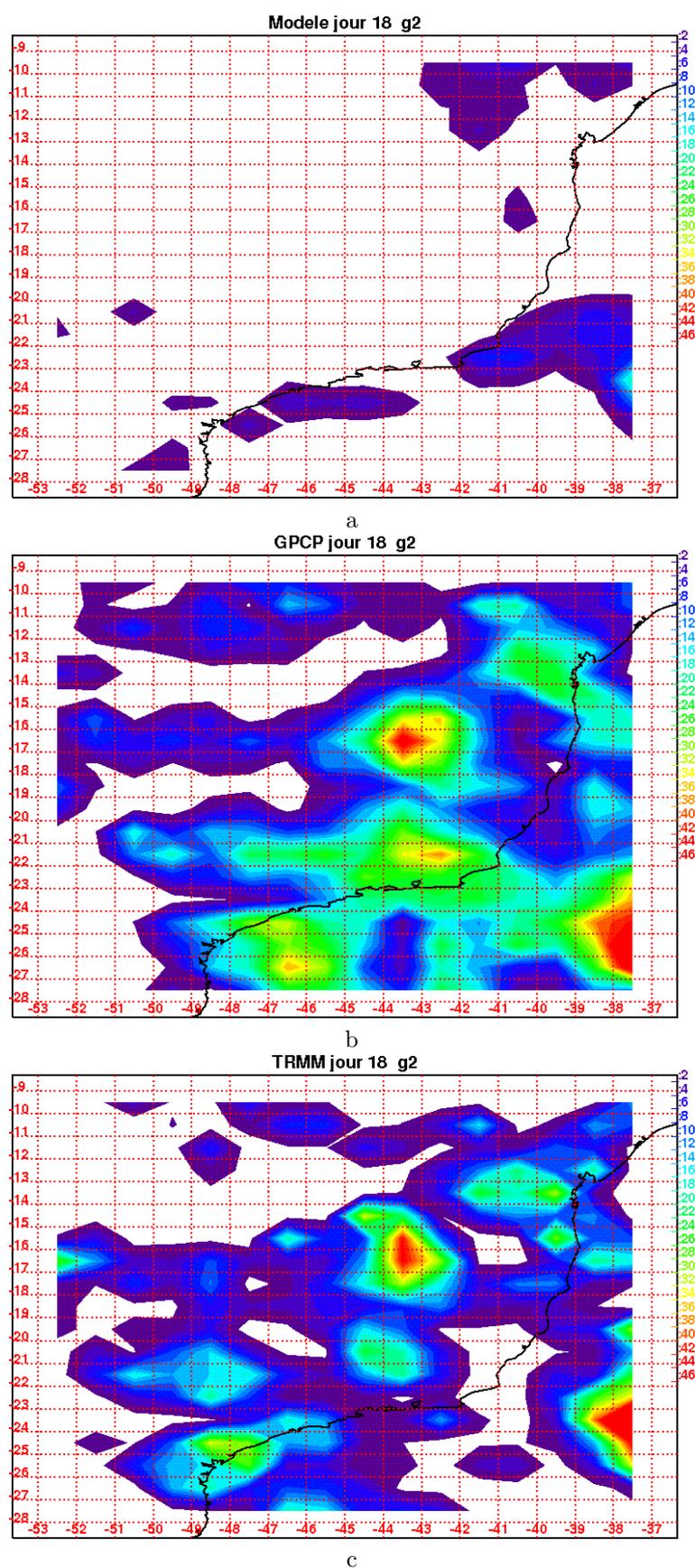


FIG. V.1.13 – Précipitations accumulées (mm) simulées sur la grille 2 (a) et estimées à partir d'observations (GPCP (b) et TRMM (c)) pour le 28 février 2004.

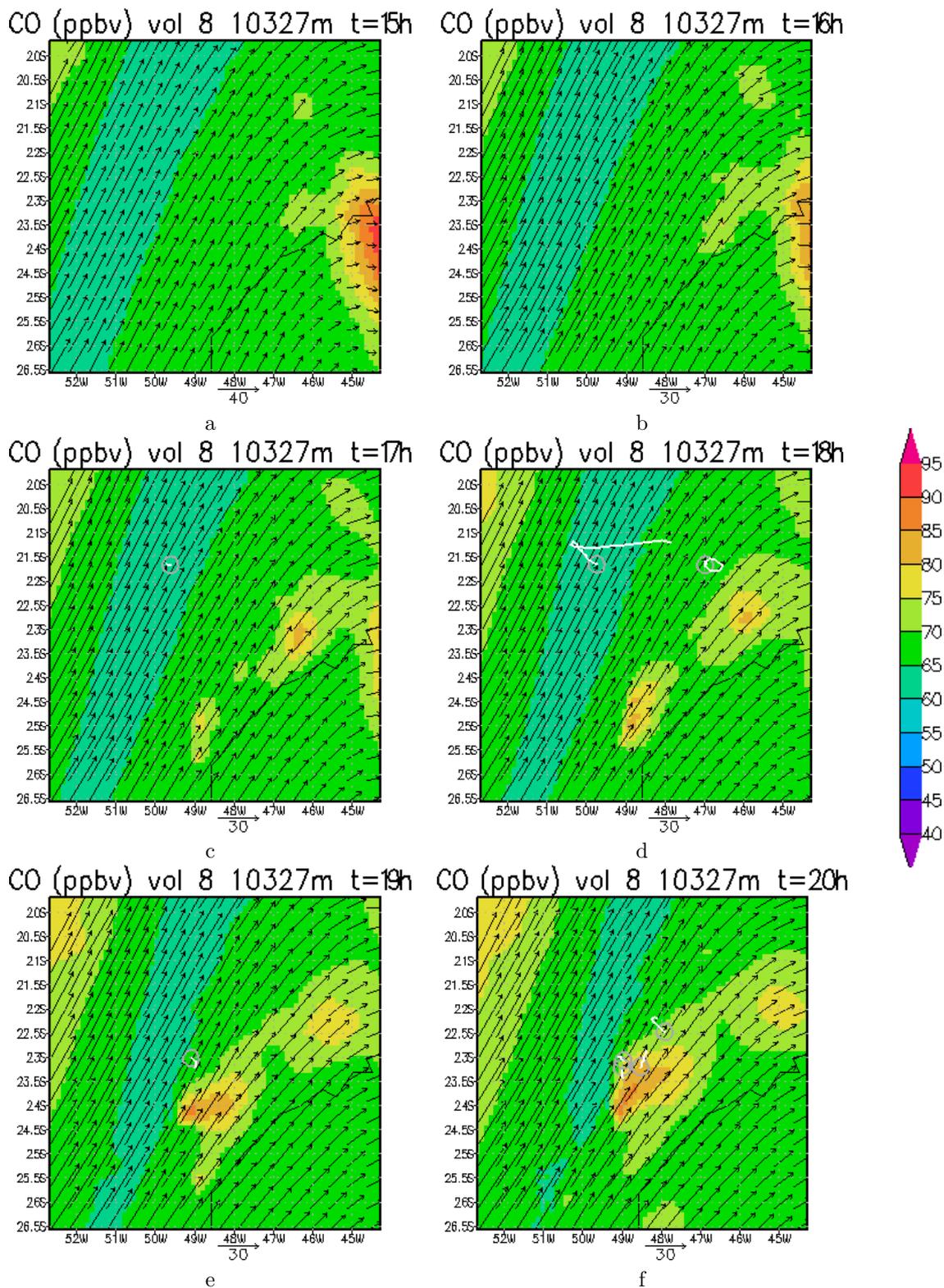


FIG. V.1.14 – Champs de CO (ppbv) et de vents horizontaux (m/s) vers 10.5 km d'altitude de 15 UTC (a) à 20 UTC (f) lors du vol 13. Le vol est affiché par un trait blanc, le rond gris indiquant le point de départ de la portion de trajectoire affichée. Cette portion correspond à la partie de la trajectoire à plus ou moins une demi heure de l'échéance du modèle. Seule les points dont l'altitude correspond au niveau du modèle sont affichés.

### Analyse du vol 13

Ce vol a été effectué le 7 mars 2004. La description de ce vol par Huntrieser *et al.* (2007) indique que la SACZ était localisée à environ 100 km au nord-est de l'aire d'observation. Dans la haute troposphère, les vents horizontaux dominants venaient du sud - sud-ouest avec une vitesse allant de 10 à 20 m/s. A 850 hPa, les vents horizontaux venaient de la direction opposée, indiquant l'advection de masses d'air différentes à différents niveaux. Cette situation est une situation typique de génération de systèmes convectifs méso-échelle dans le sud-est de l'Amérique du Sud (Salio *et al.*, 2007). Un tel système s'est effectivement développé à partir du 6 mars à 15 UTC (Huntrieser *et al.*, 2007, figure 7 a), emportant dans la haute troposphère de l'air pollué proche de Buenos Aires (visible vers -35°N et -60°E dans les sources sur la figure IV.3.5). Ceci est visible dans les mesures de CO par une forte augmentation de la concentration entre environ 47000 et 50500 s. Cette augmentation n'est pas visible dans le vol simulé. Pour en trouver la cause, j'ai utilisé des trajectoires arrière calculées à partir des champs simulés, les taux précipitants accumulés simulés et observés, ainsi que les champs horizontaux issus de la simulation.

L'augmentation mesurée entre 47000 et 50500 s suggère que le Falcon a traversé une structure de taille importante, de plusieurs centaines de kilomètres de large. La figure V.1.15 montre les champs de CO et de vents à 11 km entre 12 UTC et 14 UTC. On peut effectivement voir une large zone de forte concentration de CO dans le quart sud-ouest du domaine (entre environ -65 et -50°E et entre environ -35 et -25°N) pouvant correspondre à la structure échantillonnée par le Falcon. Les mêmes champs extraits de l'expérience sans transport par la convection profonde montrent que cette augmentation est due au déclenchement de la convection profonde paramétrisée. Bien que présente dans la simulation, cette zone de fort CO est décalée en localisation et/ou en temps, car elle n'atteint pas les points échantillonnés par le Falcon. Cela est confirmé par la comparaison des précipitations accumulées mesurées et simulées sur la journée du 7 mars (figure V.1.16). La bande de précipitations correspondant à la structure est visible dans les observations et le modèle, mais est décalée vers le sud-ouest dans la simulation. Le nord de la bande de précipitations ne dépasse pas -60°E de longitude, tandis que la bande de précipitations observée atteint environ -57°E de longitude. De plus, la bande simulée est orientée légèrement différemment de la bande observée. L'étude des trajectoires arrière montrées sur la figure V.1.17 et calculées à partir des champs issus du modèle à l'aide du code de trajectoires développé par Freitas *et al.* (2000) montre que la masse d'air échantillonnée lors du vol simulé passe à proximité d'un système convectif méso-échelle se développant environ 24 h avant les mesures. Les longitudes de départ des trajectoires atteignent la structure simulée, mais aucune augmentation de la concentration de CO n'est visible dans le vol simulé. La figure V.1.18 montre les champs de précipitations accumulées correspondants au développement du système convectif méso-échelle. En ce qui concerne les précipitations, le développement de ce système dans la simulation est très différents de ce que montrent les observations. En particulier, la phase de développement du 6 mars n'est reproduite par le modèle que plusieurs heures après son début dans les observations. La bande de précipitations se formant le 7 mars entre 0 et 3 UTC environ (soit environ à la moitié environ du développement du système qui commence à se former le 6 mars vers 15 UTC et atteint son état mature le 7 mars à 15 h UTC, Huntrieser *et al.*, 2007) est effectivement décalée spatialement, et orientée légèrement différemment de la bande observée. Ces différences (heure de déclenchement, localisation et orientation) dans le développement du système convectif méso-échelle expliquent l'absence de l'augmentation correspondante de CO dans le vol simulé.

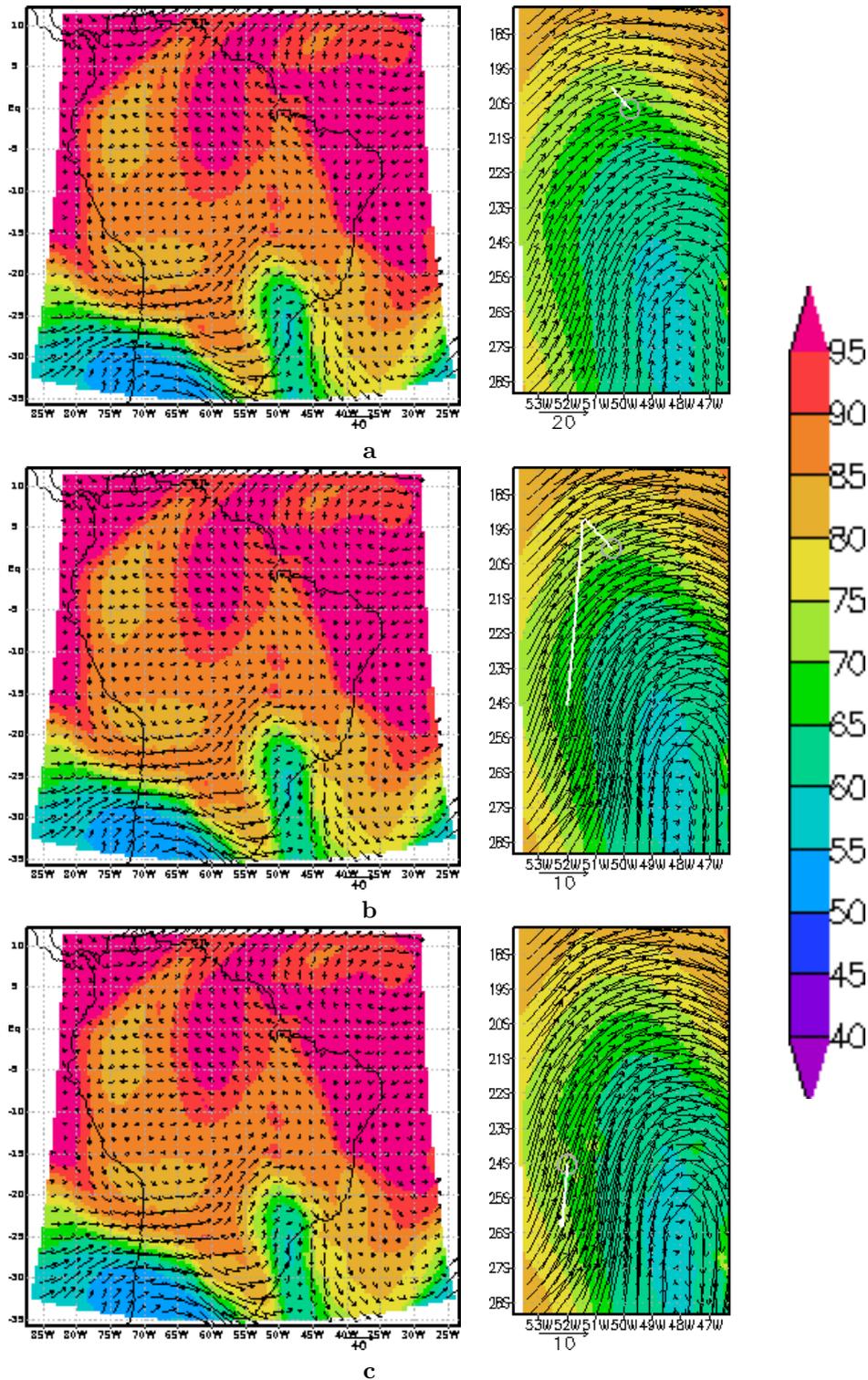


FIG. V.1.15 – Champs de CO (ppbv) et de vents horizontaux (m/s) vers 11 km d'altitude à 12 UTC (a), 13 UTC (b) et 14 UTC (c) lors du vol 13. La colonne de droite montre les champs sur la grille 1 et la colonne de droite montre les zooms autour du vol. Celui-ci est affiché par un trait blanc, le rond gris indiquant le point de départ de la portion de trajectoire affichée. Cette portion correspond à la partie de la trajectoire à plus ou moins une demi heure de l'échéance du modèle.

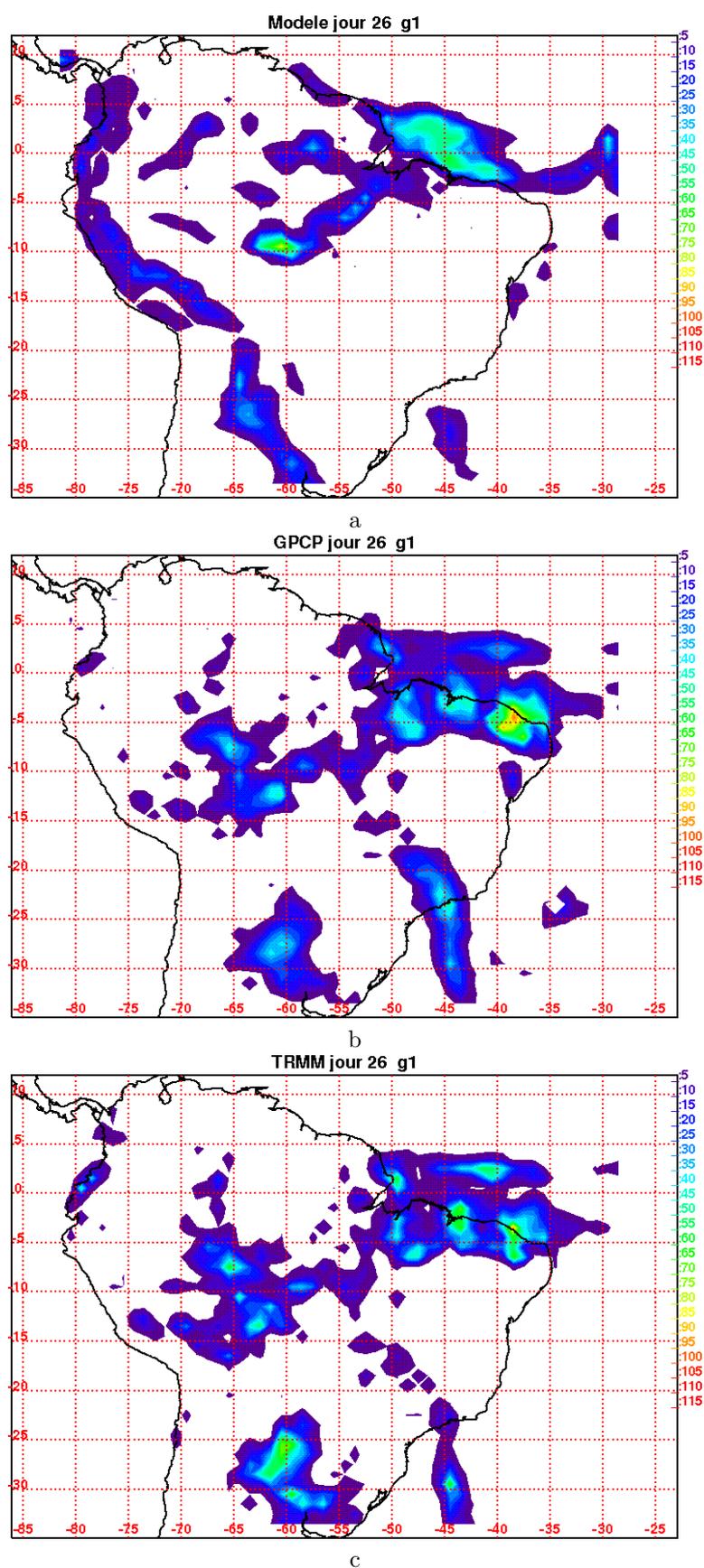


FIG. V.1.16 – Précipitations accumulées (mm) simulées sur la grille 1 (a) et estimées à partir d'observations (GPCP (b) et TRMM (c)) pour le 7 mars 2004.

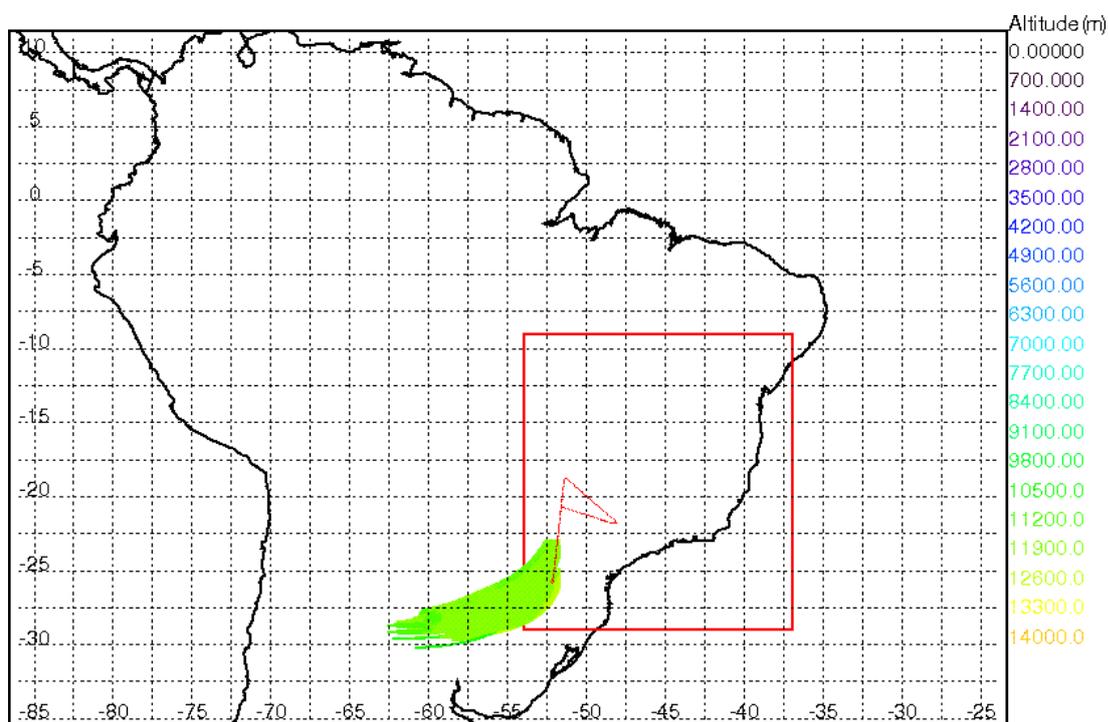


FIG. V.1.17 – Trajectoires arrières calculées à partir des champs simulés. Les trajectoires partent d'une gamme d'altitude encadrant l'altitude à laquelle est mesurée l'augmentation de CO et autour des positions du Falcon correspondantes et sur une durée de 20 h à partir du 7 mars à 13 h UTC. La trajectoire de l'avion est affichée en rouge au sein du cadre rouge délimitant le domaine couvert par la grille 2. Le code de couleur correspond à l'altitude (m).

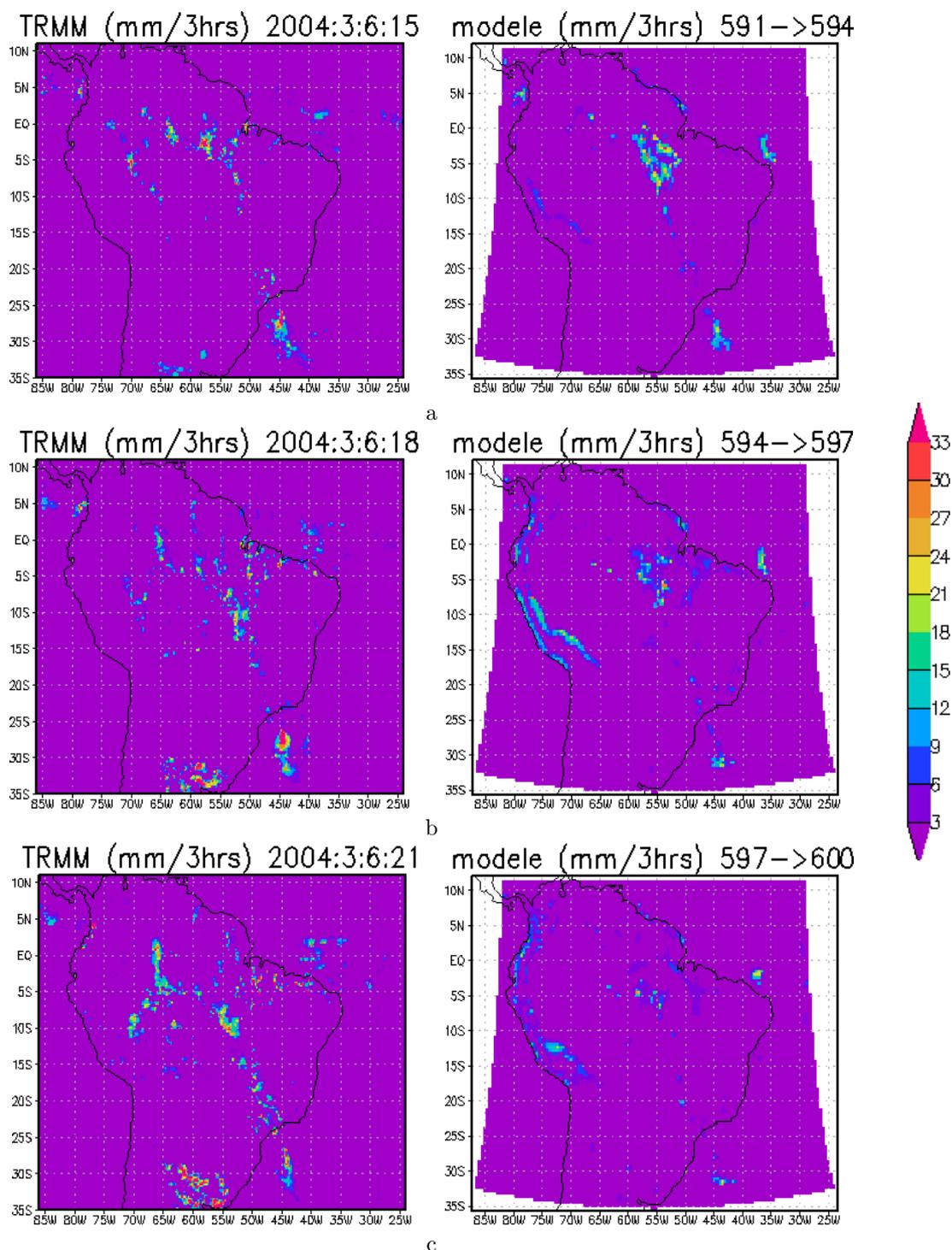
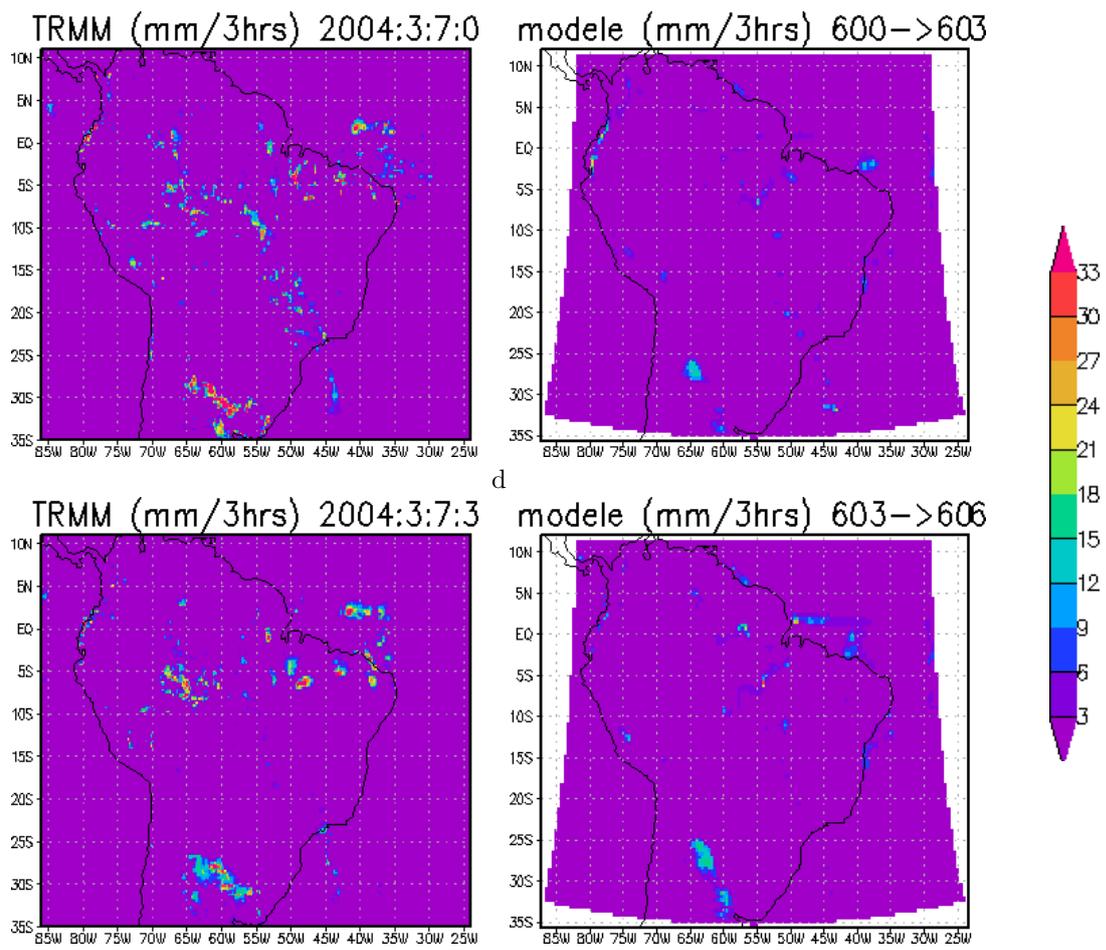


FIG. V.1.18 – Précipitations accumulées (mm) estimées à partir des produits TRMM (colonne de gauche) et simulées sur la grille 1 (colonne de droite) pour le 7 mars 2004 du 6 mars à 15 h UTC (a) au 7 mars à 03 h UTC (e). On peut voir aux environs de  $-30^{\circ}N$  et  $-60^{\circ}E$  les précipitations liées au développement d'un système convectif méso-échelle à proximité de Buenos Aires.



d

e

### V.1.5 Impact des paramétrisations des processus dynamiques

L'étude des résultats pour les champs de CO de la simulation de référence a permis de vérifier la représentation réaliste de la répartition verticale moyenne du CO avec toutefois la mise en évidence d'incertitudes dans les sources, et/ou l'initialisation, et/ou le transport convectif (localisation, instant de déclenchement, quantité de traceur transportée). Nous analysons maintenant plus précisément l'impact sur la répartition du monoxyde de carbone dans la simulation des processus de transport paramétrisés suivants : convection profonde, peu profonde et effet « plume-rise ». Ces trois processus peuvent jouer un rôle prépondérant dans le transport vertical du CO. Pour étudier leur impact, ces processus ont été exclus un à un. Remarquons que l'exclusion de l'un des transports est faite en débranchant le transport de CO dans la paramétrisation correspondante tout au long de la simulation et également lors de la période de spinup. L'advection, permettant le transport à l'échelle synoptique, est conservée pour tous les tests effectués.

#### Convection restreinte et profonde

L'influence de la convection dans les basses couches est de diminuer la concentration des traceurs en les emportant principalement dans la haute troposphère et en emportant vers les basses couches de l'air moins pollué lors des subsidences pour la convection profonde. Si l'air des basses couches emporté par la convection est plus concentré en CO, une augmentation locale de la concentration de CO dans la haute troposphère sera visible. Dans le modèle, la paramétrisation de la convection utilisée détermine l'altitude maximale atteinte par le nuage. Le CO emporté est réparti le long de la colonne convective jusqu'à l'altitude maximale déterminée par la paramétrisation.

La figure V.1.19 permet de comparer les différents profils (mesures, profil de référence, profil sans convection profonde et sans convection restreinte sur les zones échantillonnées par le Falcon). La comparaison au profil de référence montre qu'exclure le transport par convection profonde provoque une hausse de la concentration jusqu'à environ 10 km et une baisse au-dessus. Qualitativement, cela correspond à l'effet connu de la convection : sans convection profonde, les émissions ne sont pas transportées efficacement dans la haute troposphère. L'advection et la convection restreinte expliquent l'augmentation de la concentration au-dessus de la couche limite.

La convection restreinte transporte les traceurs au-delà de la couche limite planétaire, jusqu'à une altitude d'environ 5 km, influençant ainsi la quantité de CO disponible pour la convection profonde. Le profil moyen simulé sans convection restreinte est montré sur la figure V.1.19. L'accumulation de CO dans les basses couches en l'absence de convection restreinte est plus importante que sans convection profonde. La diminution de CO vers 6 km est mieux reproduite par le modèle, et l'augmentation de concentration au-dessus de 10 km est également légèrement mieux reproduite. La plus forte augmentation dans les basses couches sans convection restreinte par rapport à l'expérience sans convection profonde peut s'expliquer en partie par la fréquence à laquelle les deux types de convection interviennent. La convection restreinte intervient plus fréquemment car s'étendant jusqu'à la couche stable, comme expliqué précédemment dans le chapitre I, tandis que la convection profonde doit percer la couche stable, ce qui nécessite une instabilité convective plus importante vraisemblablement permise par la convection restreinte (Khairoutdinov & Randall, 2006). Dans l'expérience sans convection restreinte, la quantité de CO disponible dans les basses couches

étant plus élevée que dans l'expérience sans convection profonde, la quantité de CO transportée par la convection profonde est plus importante que dans la simulation de référence, expliquant ainsi l'amélioration par rapport à la simulation de référence au dessus de 9 km.

La figure V.1.20 (a) montre les erreurs quadratiques pour le profil sans convection profonde et la figure V.1.20 (b) montre ces mêmes erreurs pour le profil sans convection restreinte. Dans les deux cas, on retrouve la même tendance qu'avec le profil de référence : l'erreur est majoritairement systématique. La part systématique est cependant plus forte en dessous de 1.5 km sans convection restreinte que sans convection profonde. Cela indique un plus grand impact dans la couche limite de la convection restreinte que de la convection profonde. On note également une légère baisse de l'erreur systématique entre 2 et 3 km, ainsi qu'une augmentation de l'erreur aléatoire entre 1.5 et 3 km dans l'expérience sans convection profonde. Cela montre un impact fort de la convection restreinte sur cette gamme d'altitude et qu'une partie de l'erreur systématique provient bien de la paramétrisation restreinte. Les trois erreurs quadratiques moyennes systématiques (référence, sans convection profonde et sans convection restreinte) comportant des différences, l'erreur systématique ne provient pas de l'un seulement des processus de transport convectif paramétrisés. La comparaison des trois courbes montre que l'erreur systématique au-dessus d'environ 5 km est similaire dans les trois tests. Il est donc possible que cette erreur provienne d'un autre processus que le transport convectif, par exemple de la diffusion, ou encore des sources.

### Effet « plume-rise »

L'effet « plume-rise » est lié aux feux de biomasse, particulièrement importants en saison sèche. En saison humide, l'importance des feux de biomasse est globalement moindre, mais son impact local peut être important. Le profil vertical moyen obtenu lors de cette expérience n'est pas montré sur la figure V.1.19 car il se superpose au profil simulé de référence, montrant que l'exclusion de l'effet « plume-rise » n'amène pas de différences significatives sur le profil moyen simulé. Bien qu'aucun cas de feux de biomasse n'est été observé lors de la comparaison aux vols du Falcon, un exemple est donné sur les figures V.1.5 et V.1.5 pour illustrer l'importance à l'échelle locale de l'effet « plume rise ».

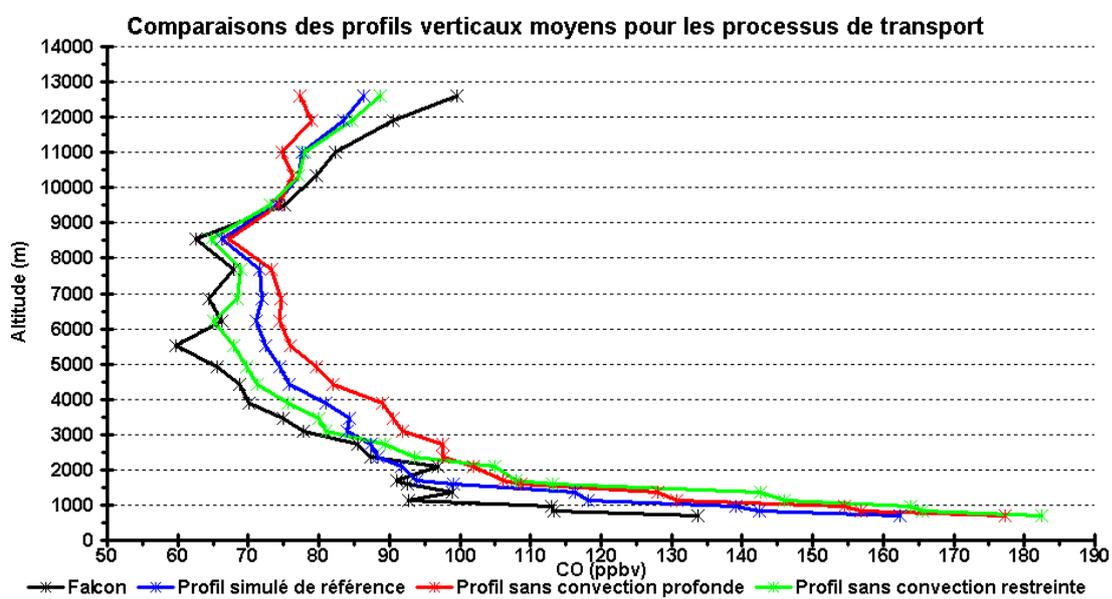


FIG. V.1.19 – Profils verticaux moyens de référence et obtenus lors des différents tests sur le transport vertical.

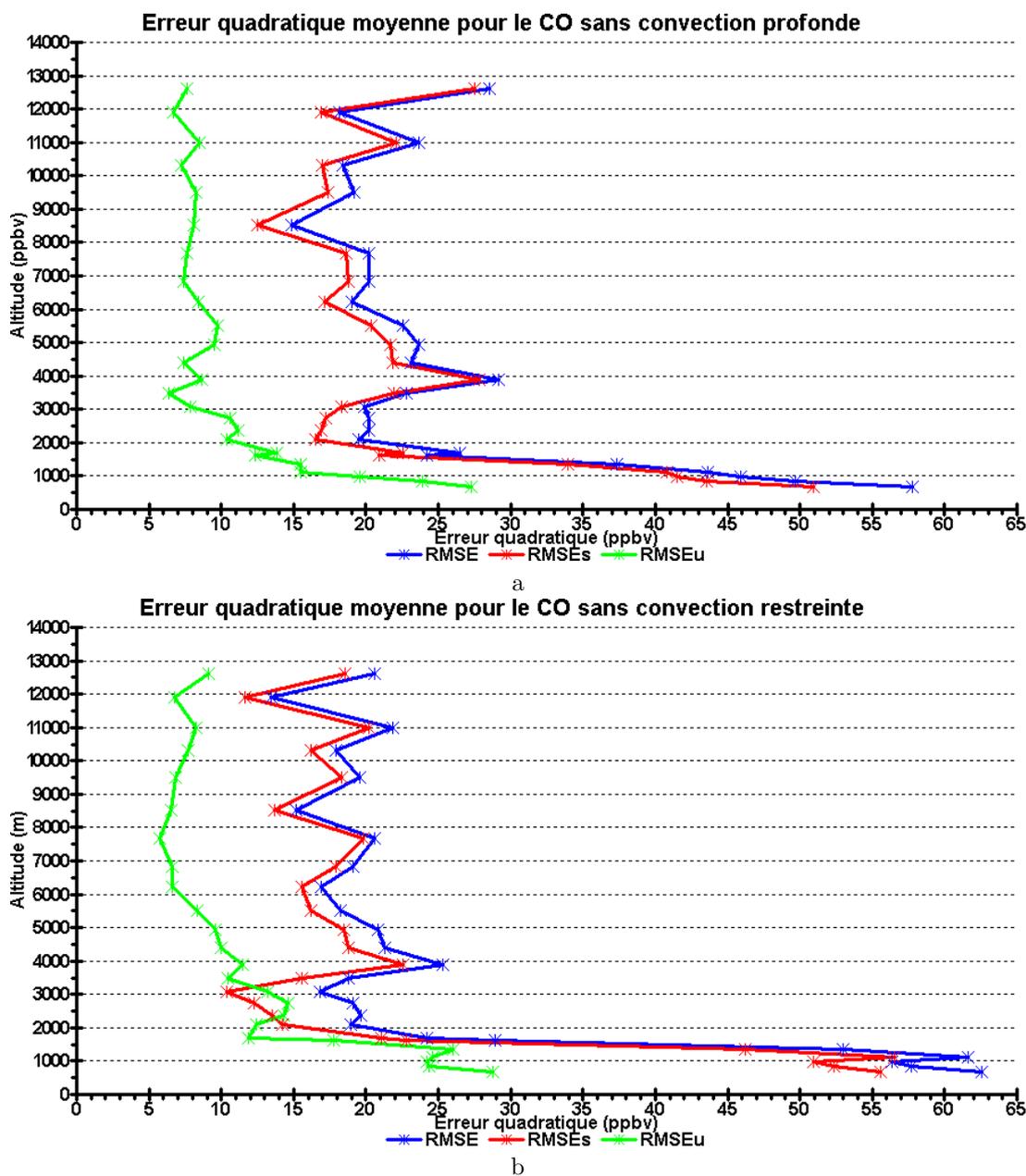


FIG. V.1.20 – Erreur quadratique moyenne (RMSE), systématique (RMSEs) et aléatoire (RMSEu) pour le test sans convection profonde (a) et sans convection restreinte (b).

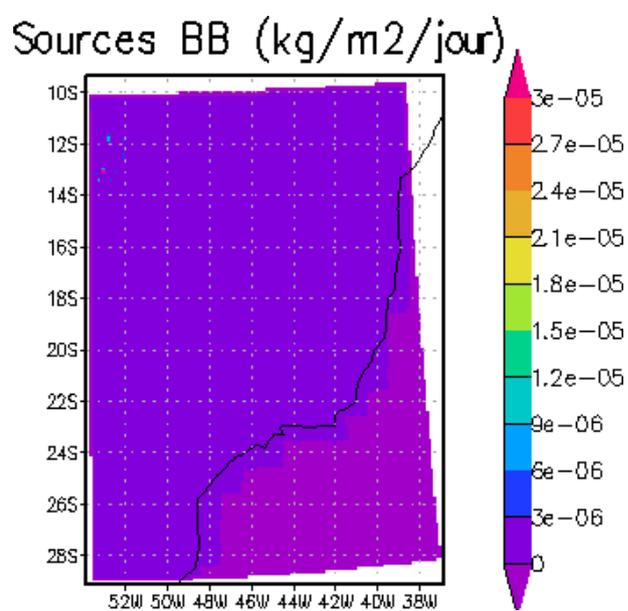


FIG. V.1.21 – Sources correspondant aux feux ayant eu lieu le 28 février 2004. Le feu utilisé pour illustrer l'effet « plume rise » est le point rouge au nord-ouest du domaine.

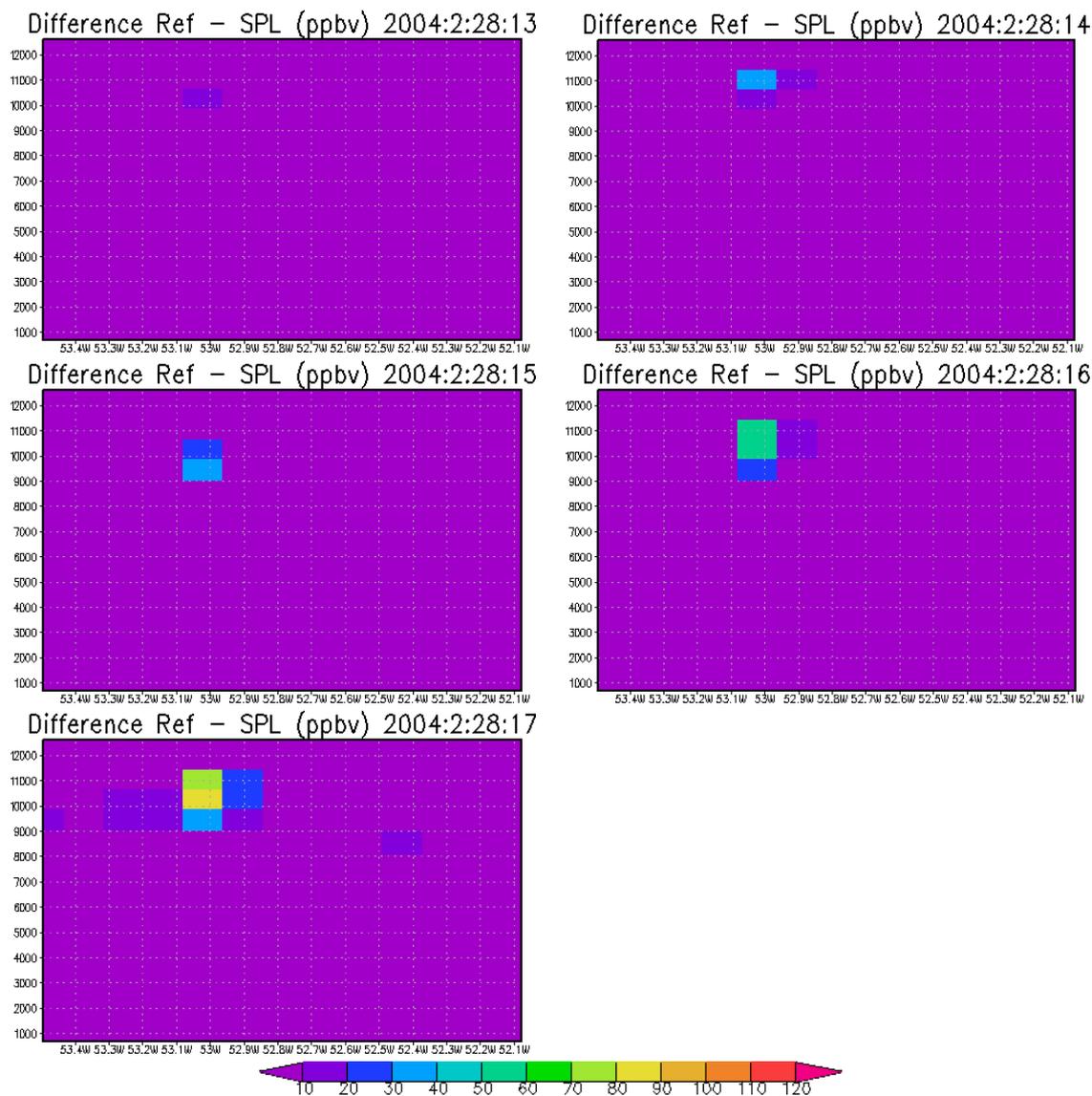
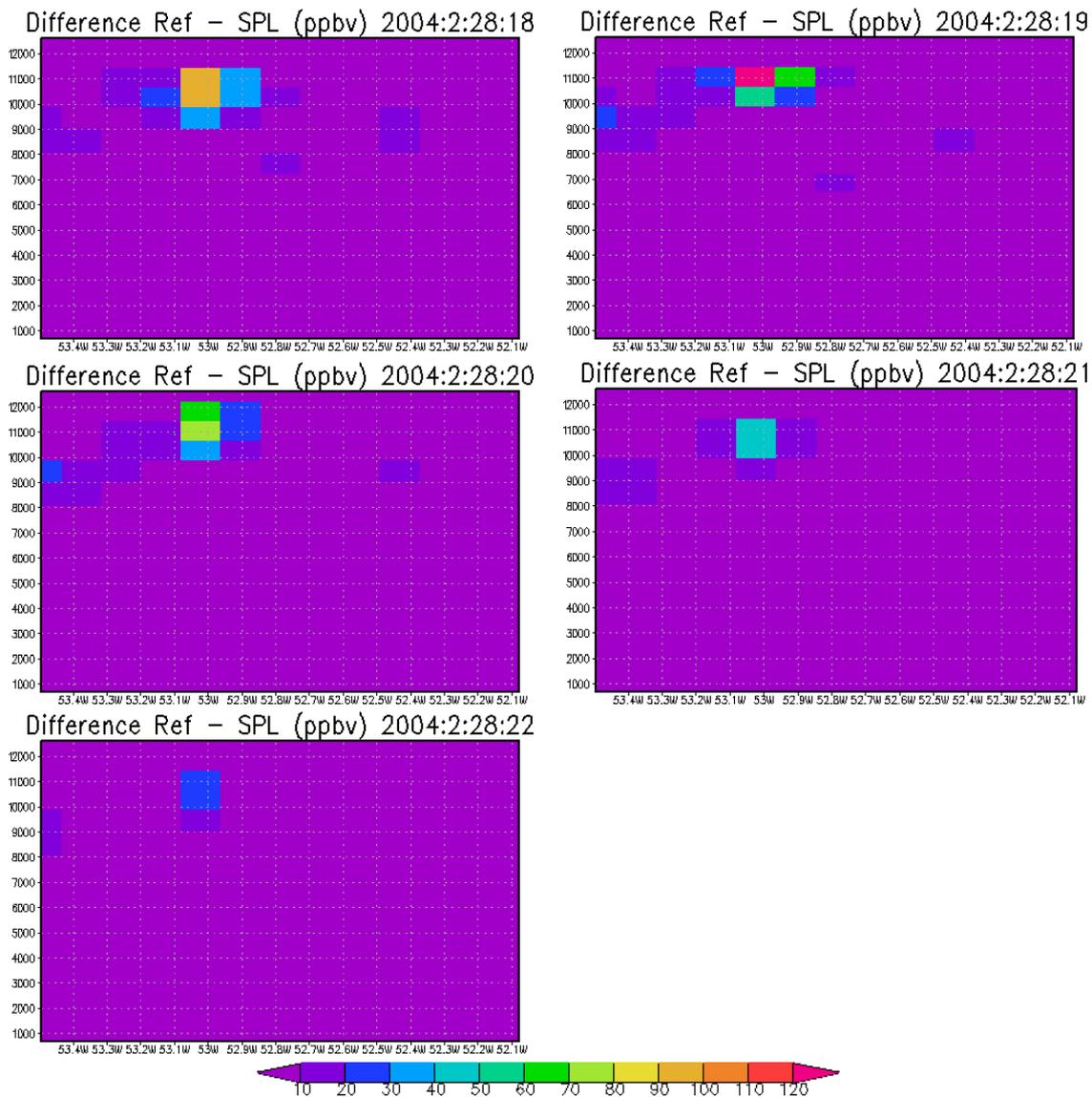


FIG. V.1.22 – Coupe verticale à  $-13^{\circ}\text{N}$  de latitude et entre  $-53.49^{\circ}\text{E}$  et  $-42.08^{\circ}\text{E}$  de longitude montrant un exemple de l'impact de l'effet « plume rise ». Le champ affiché est la différence (en ppbv) entre le champ de référence et le champ sans effet « plume rise ».



## V.2 Tests de sensibilité

Après avoir analysé les résultats de la simulation de référence, nous étudions la réponse du modèle à la variation de différents paramètres déterminants pour la distribution du CO en dehors des processus dynamiques. Nous avons testé la sensibilité du modèle aux éléments suivants : champ de concentration initial utilisé, inventaires utilisés et temps de vie du monoxyde de carbone.

### V.2.1 Champ de concentration initial

Comme cela a été dit, l'initialisation est importante. C'est en effet elle qui fixe la quantité initiale de CO dans la grille, ainsi que sa répartition spatiale initiale. Le choix fait dans la configuration opérationnelle du CATT-BRAMS est de partir d'une concentration nulle, ce qui ne prend pas en compte au départ les structures à l'échelle synoptique, qui peuvent cependant être reproduites à l'échelle continentale par la suite au cours de la simulation à l'aide des sources et du transport. Dans le cadre de la simulation présentée ici, se pose la question des contributions relatives des structures de grande échelle et des structures de petite échelle (en particulier liées aux phénomènes convectifs) à la distribution spatio-temporelle observée du CO.

Nous testons deux initialisations en plus de celle de référence. Nous utilisons la procédure utilisée en opérationnel au CPTEC (initialisation nulle sur l'ensemble du domaine, ajout de la valeur de fond de 60 *ppbv* lors du post-traitement). Nous utilisons également un champ idéalisé constant de 70 *ppbv* jusqu'à 15 *km*. Cette valeur est la valeur médiane de l'intervalle de concentration de fond recommandée par Freitas (communication personnelle). Au delà de 15 *km*, la concentration suit une décroissance exponentielle pour laquelle une concentration de 20 *ppbv* est imposée à 20 *km*, comme dans le champ initial de la simulation de référence. Ce profil permet de tester l'effet d'une valeur de fond constante prise en compte au début de la simulation et non au post-traitement.

La figure V.2.1 (a) montre le profil moyen de référence et ceux obtenus avec la procédure utilisée au CPTEC et avec le champ idéalisé, ainsi que les écart-types associés. En moyenne sur la comparaison aux mesures du Falcon, les résultats obtenus avec la simulation de référence et ceux obtenus avec l'initialisation nulle sont similaires jusqu'à 9 *km*. Au dessus, la simulation de référence donne des résultats meilleurs avec une concentration simulée plus proche de la concentration mesurée. Partir d'un champ idéalisé de CO mène à un profil moyen issu des vols simulés dont la concentration est relativement proche des autres profils issus des vols simulés, sauf entre 1.5 *km* et 4 *km* et au dessus de 10 *km*. L'allure générale de ce profil est toutefois différentes des autres profils, avec notamment une forme en C peu marquée. Pour le profil simulé de référence et celui issu de la simulation avec concentration initiale nulle, les concentrations de CO très proches l'une de l'autre en dessous de 9 *km* montrent qu'ajouter une valeur de fond de 60 *ppbv* est assez réaliste. La différence au dessus de 9 *km* s'explique donc en partie par l'apport de CO dans la haute troposphère lors de l'initialisation et en partie par le fait qu'une partie de la convection influençant les masses d'air échantillonnées par le Falcon se situe loin de sources importantes. Dans ce cas, partir d'une concentration initiale non nulle permet à la convection de transporter une quantité de CO plus importante qu'en partant d'une concentration nulle. Il convient également de remarquer que le temps de vie joue probablement un rôle dans les différences entre les deux simulations. Pour la simulation avec une initialisation idéalisée, la forme en C peu marquée indique un faible impact

de la convection dans ce profil. Cela provient vraisemblablement de la concentration initiale de CO homogène horizontalement et verticalement jusqu'à 15 km : comme pour l'initialisation nulle, la convection se déroulant loin des sources n'est pas visible en altitude car emportant une concentration de CO identique à celle déjà présente dans la haute troposphère. De plus, le temps de vie joue un rôle dans l'impact plus faible de la convection observé dans cette simulation. D'une part, la concentration diminue dans les basses couches, limitant ainsi la quantité de CO disponible pour le transport convectif. D'autre part, le temps de vie tend également à diminuer la concentration dans la haute troposphère, diminuant donc l'impact de la convection. Au final, ajouter 60 ppbv lors du post-traitement mène à une concentration globalement supérieure à celle obtenue en introduisant 70 ppbv lors de l'initialisation. Parmi les trois initialisations testées, c'est celle qui fournit les moins bons résultats.

La figure V.2.2 montre qu'en moyenne sur la simulation sur la grille 2, l'écart entre la simulation de référence (en bleu avec des croix) et les simulations avec initialisation nulle (en violet) et avec initialisation idéalisée (en violet pastel) est plus important aussi bien pour la quantité de CO que pour sa répartition verticale. L'initialisation joue donc un rôle important à grande échelle. On peut voir également que partir d'une concentration nulle puis ajouter une concentration de fond de 60 ppbv ou partir directement de 70 ppbv conduit à des résultats très proches pour la concentration de CO en moyenne sur la grille 2. Le temps de vie baisse donc la concentration de CO d'environ 10 ppbv en moyenne sur la simulation. De plus, les profils moyens sur la grille 2 issus de la simulation de référence et de la simulation avec initialisation nulle sont différents sur l'ensemble du profil. Cela montre que l'échantillonnage effectué par le Falcon joue un rôle important dans l'accord en dessous de 9 km entre les profils issus des vols simulés.

D'une initialisation à l'autre, la variabilité suit une variation verticale similaire (figure V.2.1 b). Elle est forte en dessous de 1.5 km et beaucoup plus faible au dessus. Le profil idéalisé a une variabilité en dessous de 1.5 km inférieure à celle du profil obtenu avec la concentration initiale nulle, mais supérieure à la variabilité du profil de référence. La démarche utilisée au CPTEC permet d'avoir une variabilité en dessous de 1.5 km supérieure à celle obtenue lors des autres tests. Au dessus de 1.5 km, la variabilité la plus forte est rencontrée dans l'expérience de référence et la plus faible variabilité est rencontrée dans l'expérience où la concentration initiale est nulle. La forte variabilité près de la surface provient probablement majoritairement des sources. La diminution de la variabilité près de la surface lorsque la concentration initiale est forte est partiellement liée à l'application dans le modèle du temps de vie de CO. En effet, la diminution due au temps de vie est proportionnelle à la concentration de CO disponible. Par conséquent, plus la concentration augmente, plus la diminution est forte. La variabilité résulte alors de la compétition entre l'augmentation due aux émissions et la diminution due au temps de vie. La plus faible variabilité de la simulation avec concentration initiale nulle par rapport à la simulation de référence au dessus de 4 km provient de la plus grande variation d'amplitude moyenne obtenue avec l'initialisation de référence. En effet, lors des vols où la concentration mesurée est élevée, la concentration reproduite dans la simulation de référence est souvent plus élevée que dans la simulation avec initialisation nulle. Dans les cas de vols peu pollués, c'est également le cas, avec cependant un écart un peu plus faible. La simulation de référence fournit une plus grande variabilité qui est plus réaliste que les autres simulations. Ceci est lié à une meilleure représentation dans la simulation du transport synoptique sur la distribution du CO dans la troposphère libre.

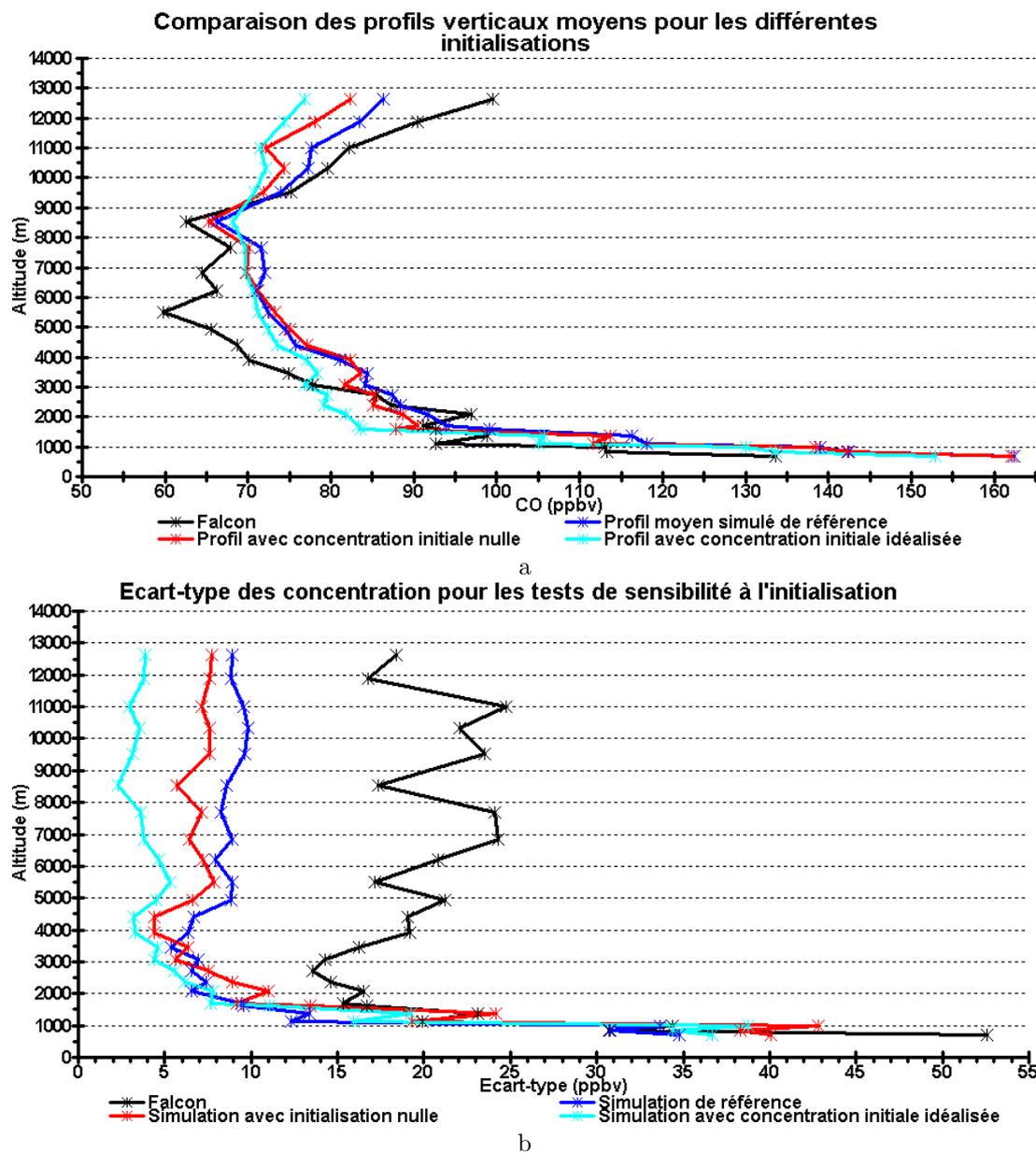


FIG. V.2.1 – Profils moyens mesuré et simulés avec différentes initialisations (a) et écart-types associés (b).

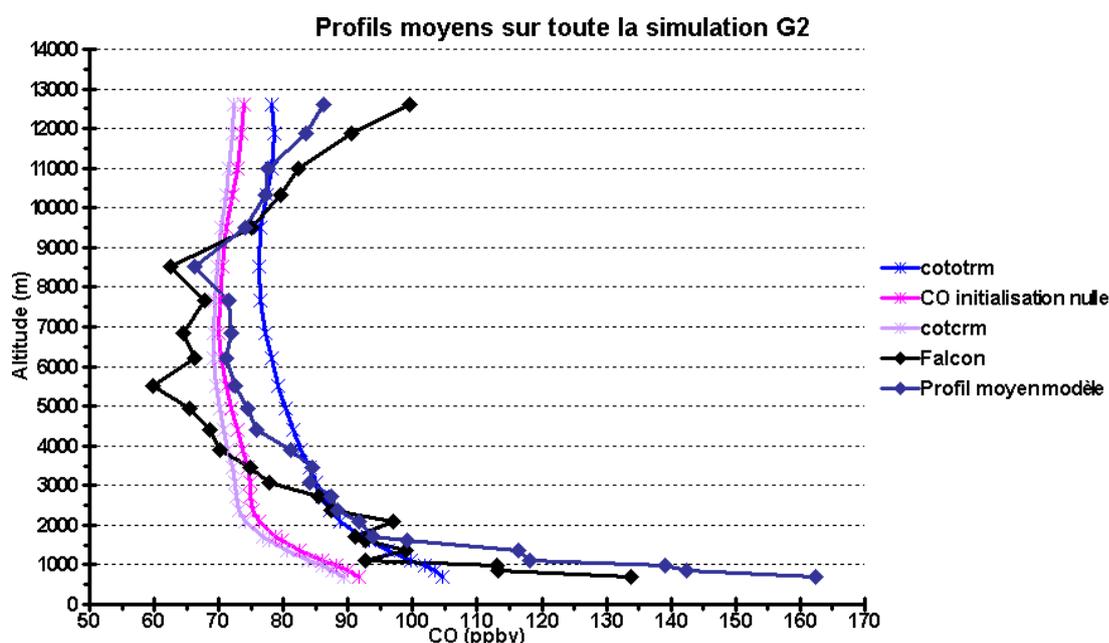


FIG. V.2.2 – Profils moyens issus des mesures du Falcon, des vols simulés, sur toute la simulation sur la grille 2 pour la simulation de référence, pour la simulation avec initialisation nulle et pour la simulation avec initialisation idéalisée.

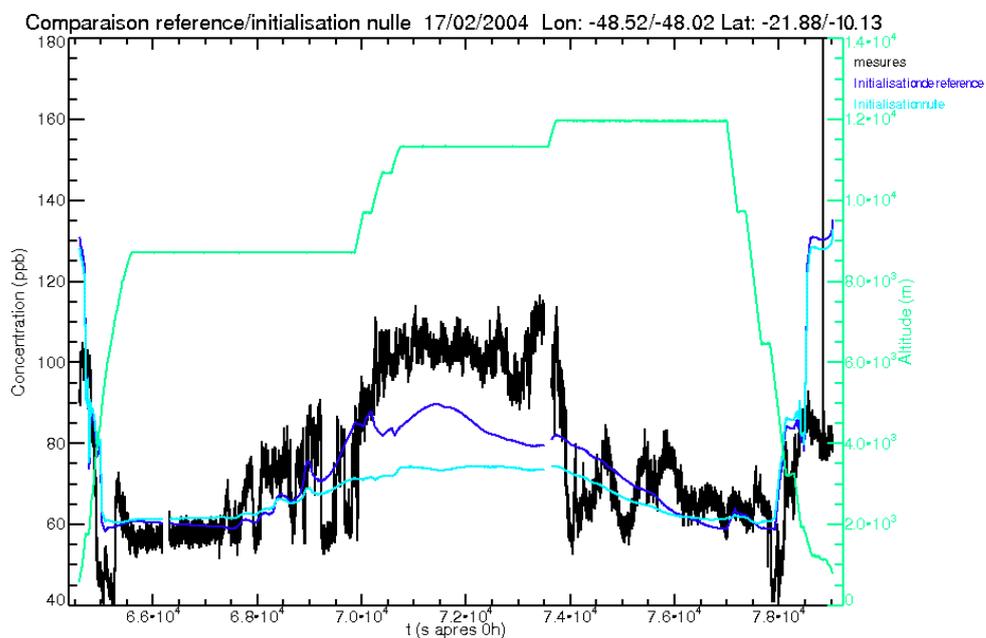
Des différences locales sont visibles entre les deux initialisations. En particulier, deux vols (figure V.2.3) montrent des différences significatives : les vols 4 (figure V.2.3 a) et 9 (figure V.2.3 b). Pour les vols 4 et 9, les champs horizontaux simulés correspondants aux altitudes et à l'instant où les augmentations de CO ont été mesurées sont respectivement montrés sur les figures V.2.4 et V.2.6.

Pour le vol 4, dans la simulation de référence, l'augmentation de la concentration de CO mesurée au milieu du vol est visible dans le vol simulé avec l'initialisation de référence. Au contraire, dans la simulation réalisée en utilisant la méthode du CPTEC, cette augmentation n'est pas visible. La figure V.2.4 (a) montre que la structure échantillonnée lors du vol dans la simulation de référence est située au nord du domaine. Cette structure est également présente dans les champs provenant de l'expérience sans convection profonde (figure V.2.4 c), ce qui indique qu'elle n'est pas due à la convection profonde paramétrisée. Il peut donc s'agir d'une structure de grande échelle ou d'un phénomène convectif résolu sans la paramétrisation de la convection. La figure V.2.5 montre qu'il s'agit d'une structure convective étendue. Dans les champs provenant de l'expérience où l'initialisation est nulle, cette structure et les structures au nord de la grille 2 ne sont pas visibles. L'explication est que la convection ayant formé la structure échantillonnée par le Falcon n'est pas située à côté de sources importantes et emporte donc dans la haute troposphère des masses d'air dont la concentration en CO est identique à celle déjà présente en altitude dans la simulation avec initialisation nulle.

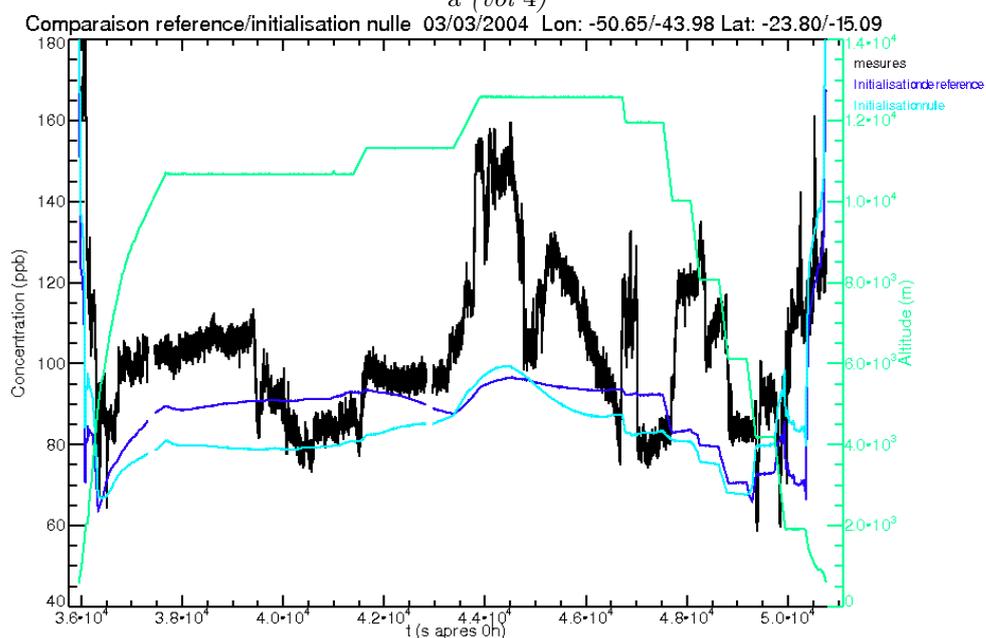
Dans le vol 9, au contraire, la forte augmentation de la concentration mesurée à environ 45000 s n'est pas visible dans la simulation de référence, mais l'est dans la simulation où la concentration initiale est nulle. La comparaison entre les figures V.2.6 (b) (expérience avec initialisation nulle) et (c) (expérience sans convection profonde) montre que la structure échantillonnée entre  $-45$  et  $-44^\circ\text{E}$  et  $-19.5$  et  $-21.5^\circ\text{N}$  est due à la convection paramétrisée, la concentration au sein de cette structure

étant supérieure d'une dizaine de ppbv à la concentration environnante. Les champs issus de la simulation de référence (figure V.2.6 a) montrent que cette structure, bien que présente, se détache peu de la concentration environnante. Dans ce cas, c'est la faible différence dans la simulation de référence entre la concentration disponible pour la convection profonde et la concentration aux altitudes de déentraînement qui masque la structure dans le vol simulé.

L'initialisation des champs de CO est très importante à grande échelle. Elle impose la concentration moyenne, influence fortement la variabilité spatio-temporelle et la répartition des traceurs, comme l'ont montré les profils moyens sur toute la simulation et sur la grille 2. Dans notre cas d'étude, introduire un champ constant sur une majeure partie du volume simulé est un état initial peu réaliste qui ne convient pas à nos objectifs. En moyenne sur la simulation et sur les points échantillonnés par le Falcon, l'initialisation induit également des différences, principalement dans la haute troposphère. En effet, partir d'une concentration initiale nulle ne permet pas un transport significatif de CO par la convection profonde lorsque celle-ci est localisée loin des sources. Dans ce cas, l'initialisation de référence produit de meilleurs résultats. A l'échelle locale (au cours d'un vol), il est plus délicat de trancher entre les deux initialisations, chacune apportant des informations différentes. L'initialisation de référence prend en compte la répartition synoptique de la concentration de CO, avec toutes fois quelques incertitudes, tandis que l'initialisation utilisée au CPTEC ne prend en compte que la répartition à l'échelle continentale donnée uniquement par les sources et le transport lors de la période de spinup et lors de la simulation. Globalement, c'est l'initialisation de référence qui mène aux meilleurs résultats.



a (vol 4)



b (vol 9)

FIG. V.2.3 – Concentration de CO (ppbv) en fonction du temps pour les vols 4 (a) et 9 (b). La courbe verte représente l'altitude du Falcon (échelle à droite), les courbes noire, bleu foncé et bleu clair représentent respectivement les mesures du Falcon, la simulation de référence et la simulation avec initialisation nulle.

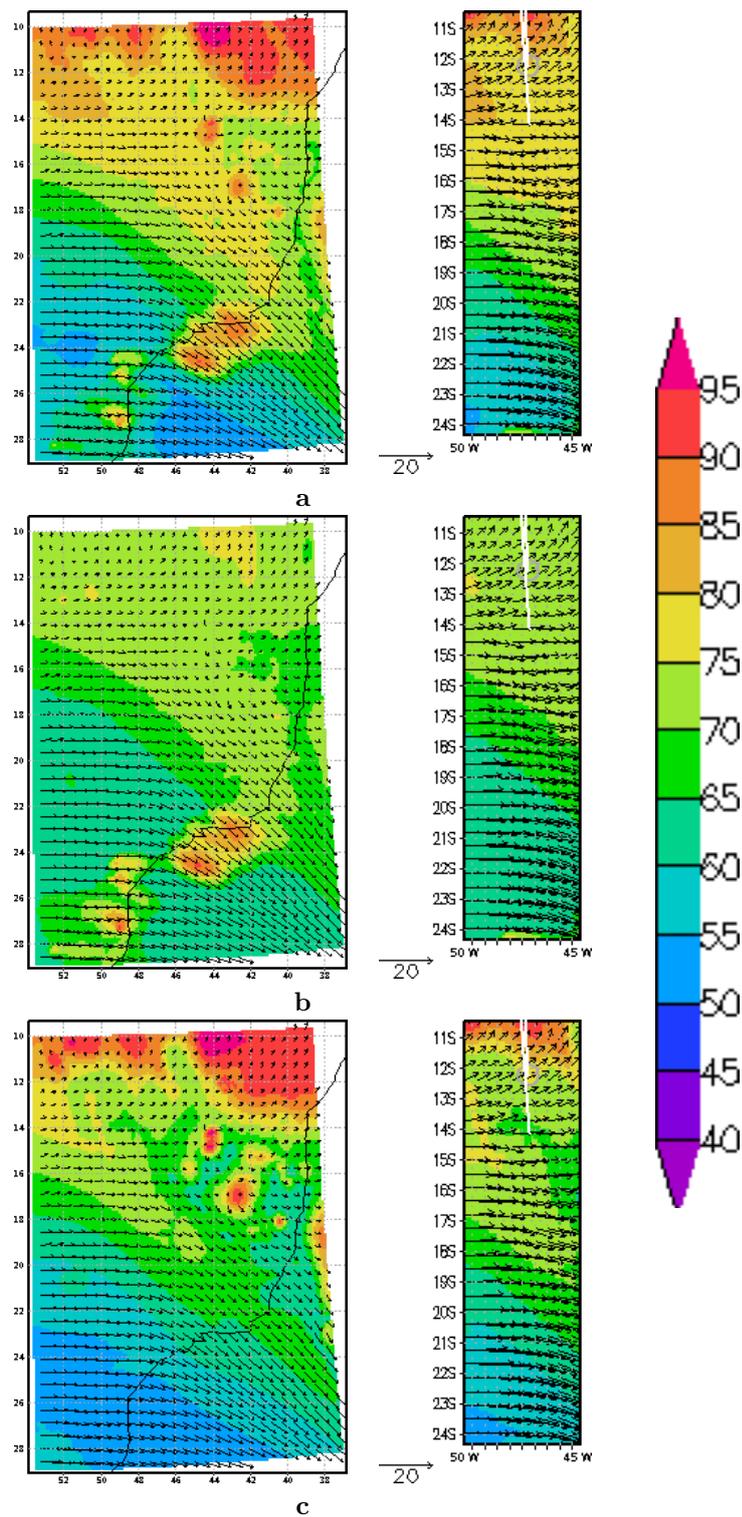


FIG. V.2.4 – Champs de CO (ppbv) et de vents horizontaux (m/s) vers 11 km d'altitude à 20 UTC lors du vol 4. La colonne de gauche montre les champs sur la grille 2 et la colonne de droite un zoom autour du vol. Ce dernier est représenté par le trait blanc sur les figures de droite, le cercle gris correspondant au point de départ de la portion de vol affichée correspondant aux mesures effectuées entre 19 : 30 UTC et 20 : 30 UTC. Les champs présentés proviennent de la simulation de référence (a), de l'expérience avec initialisation nulle (b) et de l'expérience sans convection profonde (c). Le zoom couvre les longitudes allant de -50° E à -45° E.

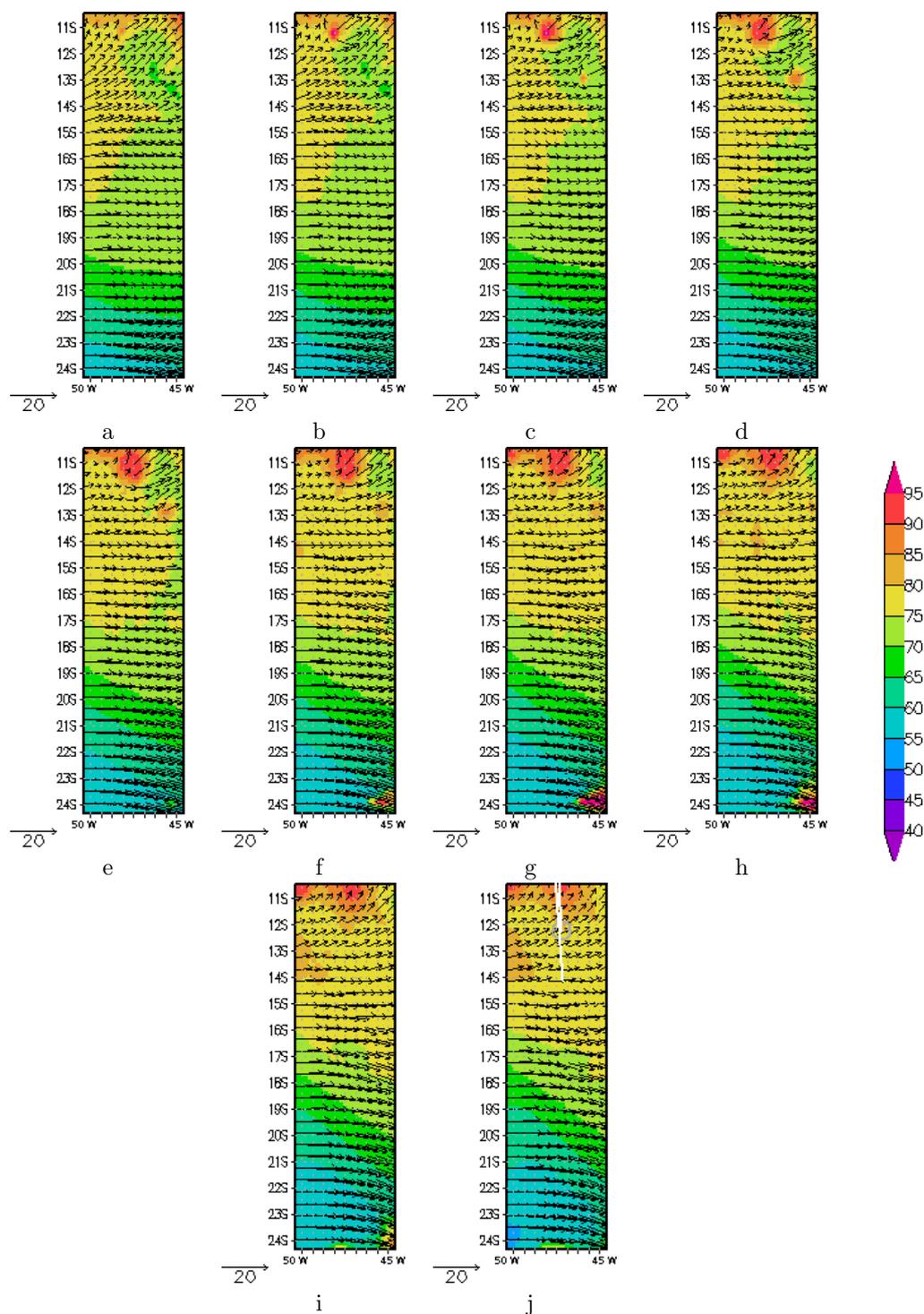


FIG. V.2.5 – ZOOMS sur les champs de CO (ppbv) et de vents horizontaux (m/s) autour du vol 4 vers 11 km d'altitude entre 11 UTC (a) et 20 UTC (j). Le vol est représenté par le trait blanc, le cercle gris correspondant au point de départ de la portion de vol affichée correspondant aux mesures effectuées entre 19 : 30 UTC et 20 : 30 UTC. Les champs présentés proviennent de la simulation de référence. Le zoom couvre les longitudes allant de  $-50^{\circ}E$  à  $-45^{\circ}E$ . Le phénomène est localisé vers  $-11.5^{\circ}N$  et  $-48^{\circ}E$ .

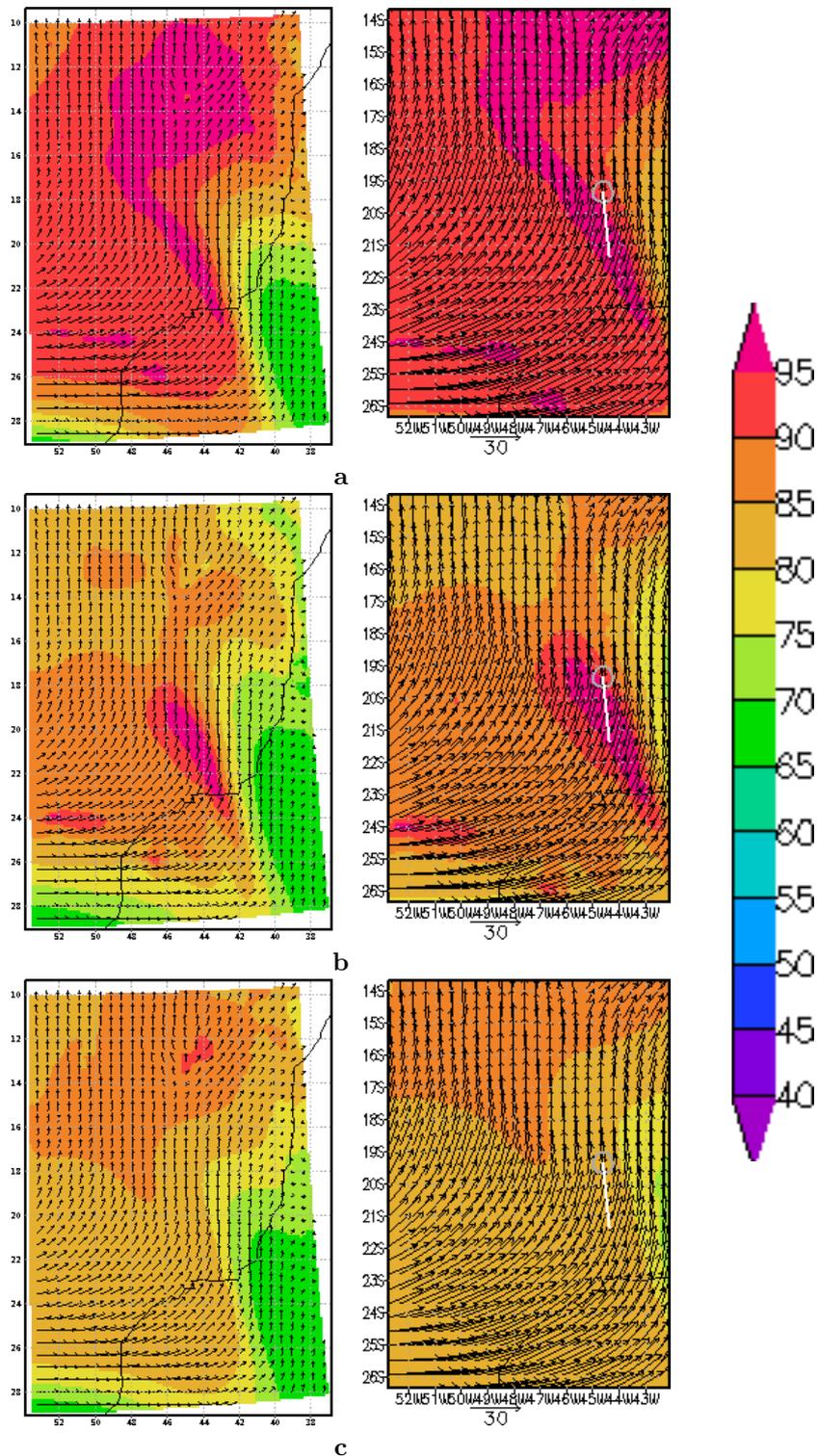


FIG. V.2.6 – Champs de CO (ppbv) et de vents horizontaux (m/s) vers 12.5 km d'altitude à 12 UTC lors du vol 9. La colonne de gauche montre les champs sur la grille 2 et la colonne de droite un zoom autour du vol. Ce dernier est représenté par le trait blanc sur les figures de droite, le cercle gris correspondant au point de départ de la portion de vol affichée correspondant aux mesures effectuées entre 11h30 UTC et 13h30 UTC. Les champs présentés proviennent de la simulation de référence (a), de l'expérience avec initialisation nulle (b) et de l'expérience sans convection profonde (c).

## V.2.2 Inventaires

Dans la simulation de référence, les cadastres utilisés sont celui de RETRO modifié par Alonso pour les émissions anthropiques, de 3BEM pour les émissions dues aux feux de biomasse et de POET pour les pseudo-émissions biogéniques. Or, plusieurs cadastres d'émissions sont disponibles. Ils donnent des émissions de CO plus ou moins différentes. Il est important de savoir si cela influence fortement ou non les résultats obtenus. En particulier, les émissions dues aux feux de biomasse fournies par la base de données EDGAR sont assez grossières et ne reflètent a priori pas correctement la variabilité spatiale et temporelle de ces sources, comme montré par Longo *et al.* (2007). Pour les émissions anthropiques, nous testons deux cadastres d'émissions : les cadastres originaux de RETRO et ceux d'EDGAR. Outre la quantité de CO émise, l'une des différences pouvant avoir un impact fort est la résolution spatiale : EDGAR à une résolution de  $1^\circ$ , soit une surface d'émissions 4 fois plus grande que RETRO. Nous testons également le cadastre des émissions des feux de biomasse provenant d'EDGAR.

La figure V.2.7 montre les profils verticaux moyens sur tous les points de mesure du Falcon obtenus avec les mesures, la simulation de référence et l'inventaire des feux de biomasse d'EDGAR (COTOTBEDG). Les profils obtenus avec les autres inventaires ne sont pas affichés car ils sont très proches du profil simulé de référence. Entre le profil de référence (COTOTRM) et le profil obtenu avec l'inventaire original de RETRO (COTOTR), la différence moyenne est d'environ  $-0.39$  ppbv et ne dépasse pas  $2$  ppbv en valeur absolue. La concentration de CO du profil vertical moyen de référence est généralement supérieure à la concentration du profil COTOTR et en est toujours très proche. L'utilisation de l'inventaire d'EDGAR pour les émissions anthropiques (COTOTBEDG) induit des différences un peu plus élevées. La différence moyenne est d'environ  $-1.53$  ppbv et reste inférieure à  $8$  ppbv en valeur absolue. Le profil de référence est toujours supérieur au profil COTOTEDG. La différence de résolution entre l'inventaire d'EDGAR et celui de RETRO est telle que l'on pouvait a priori s'attendre à un transport de CO plus fréquent, donc plus important, par la convection. En effet, les zones de fortes émissions sont plus étalées à une résolution de  $1^\circ$  (EDGAR) et ont donc a priori une probabilité plus importante que celle de RETRO d'être emportées par la convection. Ces tests de sensibilité montrent qu'il n'en est rien. Le peu de différences observées trouve son explication dans les faibles écarts entre les deux cadastres (figure V.2.8).

Des différences importantes sont visibles entre le profil de référence et le profil obtenu en utilisant l'inventaire d'EDGAR pour les émissions de feux de biomasse. La différence moyenne est de  $-7.55$  ppbv et est de  $31$  ppbv en valeur absolue au maximum. Les différences les plus fortes ont lieu dans les basses couches en-dessous de  $2$  km, mais restent importantes jusqu'à  $6$  km. La concentration obtenue est toujours inférieure à la concentration du profil de référence. Une étude des sources montre que la moyenne des émissions de feux de biomasse d'EDGAR sont proches de celles du modèle 3BEM sur la grille 1 et sur la période simulée ( $9.1 \cdot 10^{-10}$  kg/m<sup>2</sup>/jour pour 3BEM et  $1.21 \cdot 10^{-9}$  kg/m<sup>2</sup>/jour pour EDGAR), mais que ceci n'est pas le cas sur la grille 2, comme le montrent la figure V.2.9. La moyenne des émissions sur la grille 2 pour EDGAR est d'environ  $2.38 \cdot 10^{-10}$  kg/m<sup>2</sup>/jour et celui des émissions du modèle 3BEM est d'environ  $1.59 \cdot 10^{-9}$  kg/m<sup>2</sup>/jour. Ces fortes différences d'émissions expliquent les différences observées entre le profil de référence et le profil obtenu en utilisant les émissions de la base de données EDGAR. De plus, les faibles différences au dessus de  $6$  km d'altitude indiquent que ce ne sont pas majoritairement les émissions

de feux de biomasse qui sont transportés dans haute troposphère par la convection profonde dans l'échantillonnage du Falcon.

En résumé, les émissions anthropiques diffèrent peu d'un cadastre à l'autre. Ces différences n'ont pas de répercussions notables sur les résultats obtenus sur les profils verticaux issus de la comparaison aux mesures aéroportées, ni sur les vols. Ce n'est pas le cas avec les émissions des feux de biomasse. EDGAR utilise et fourni des données plutôt climatologiques avec un faible degrés de détails à l'échelle sub-continentale. Le modèle 3BEM est conçu pour justement fournir ces détails et améliore a priori la description des émissions dans le modèle.

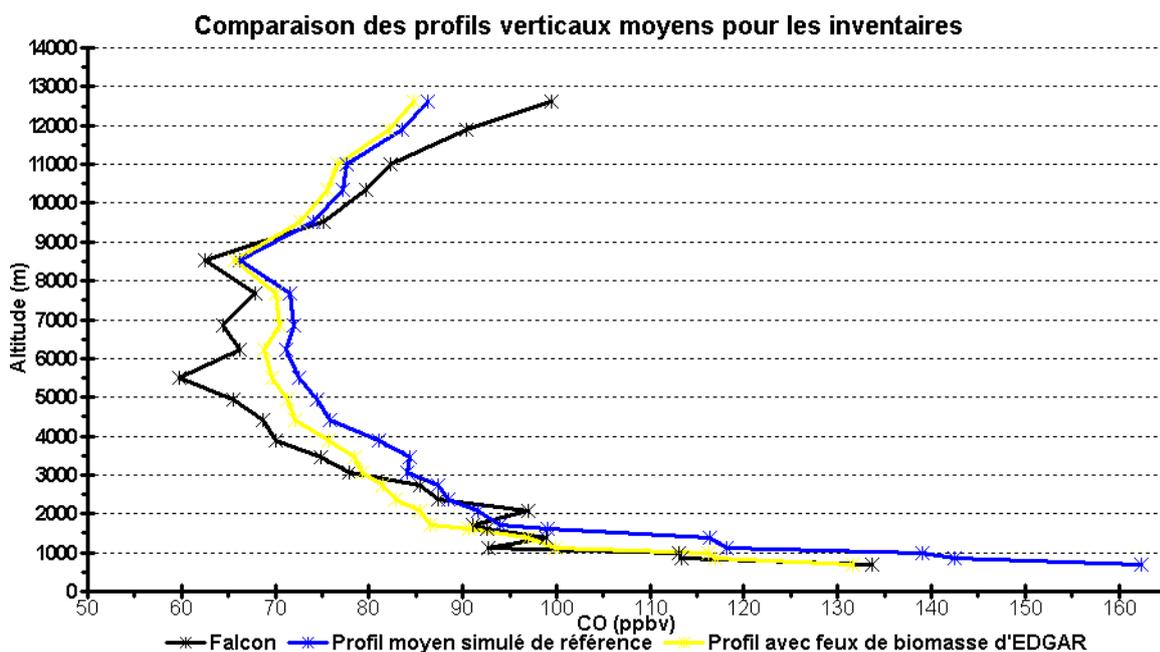


FIG. V.2.7 – Profils moyens de CO (ppbv) issus des vols obtenus avec l'utilisation de différents cadastres d'émissions. Les différences sont très faibles au-dessus de 8 km, montrant que les émissions dues aux feux de biomasse ne sont pas les émissions majoritairement emportées dans la haute troposphère.

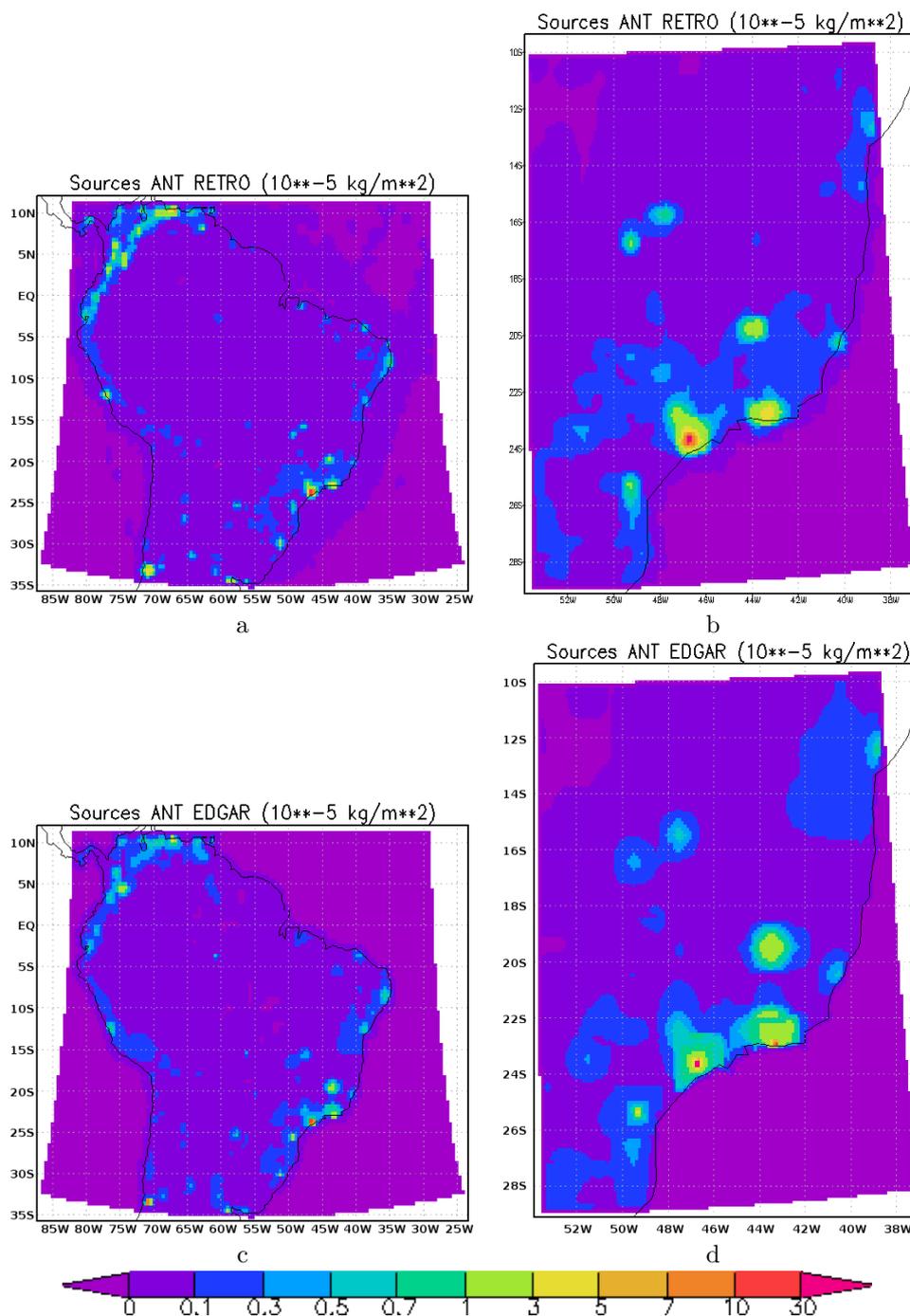


FIG. V.2.8 – Champs des émissions anthropiques accumulées sur la grille 1 (colonne de gauche) et sur la grille 2 (colonne de droite) pour l'inventaire RETRO (a et b) et pour l'inventaire EDGAR (c et d). Les flux sont donnés en  $10^{-5} \text{ kg/m}^2$ .

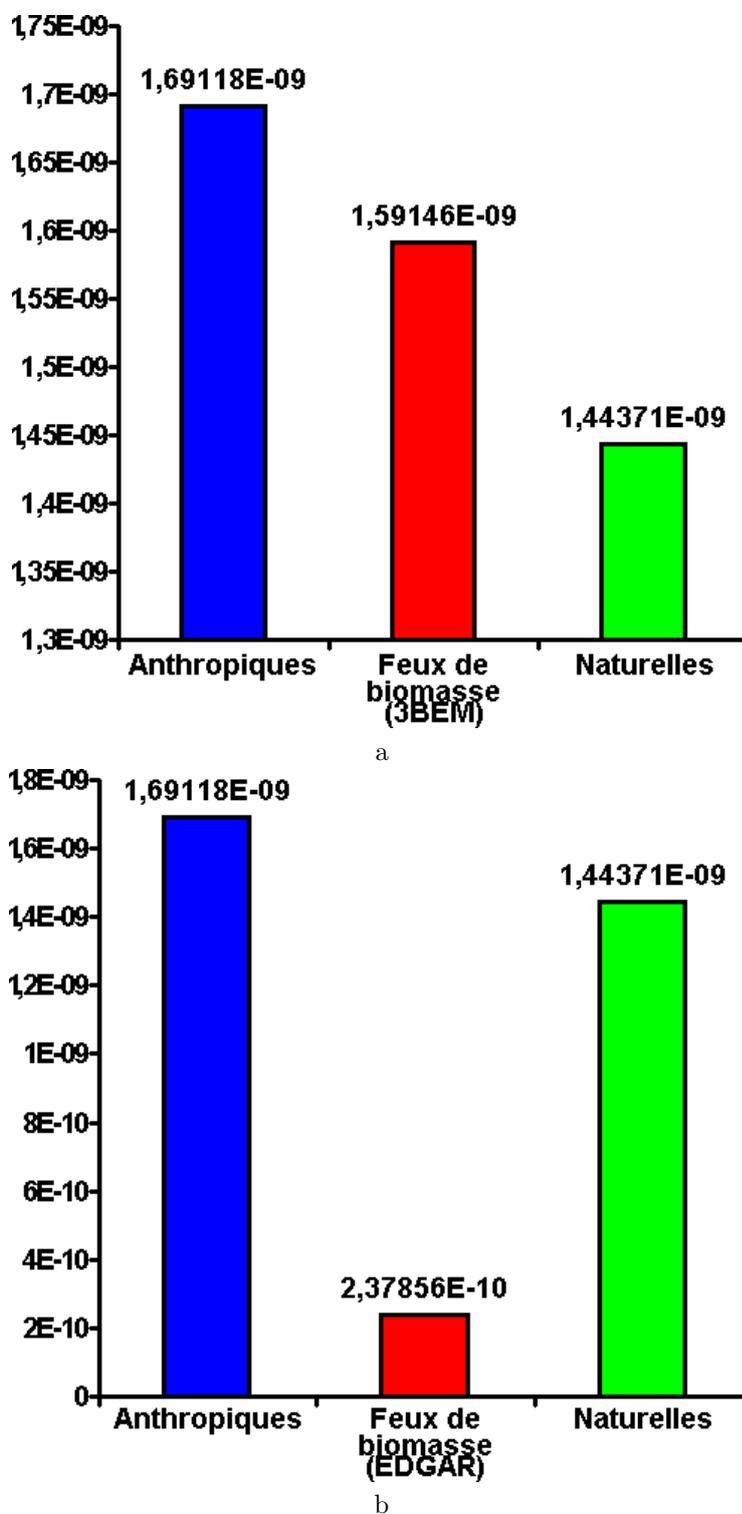


FIG. V.2.9 – Flux moyen sur la simulation (kg/m²/jour) de chacun des type d’émission sur la grille 2 selon l’inventaire d’émissions de feux de biomasse utilisé (3BEM, en a, et EDGAR, en b).

### V.2.3 Temps de vie du CO

Dans le modèle, nous avons utilisé un temps de vie de 2 mois en moyenne. Ce temps de vie correspond au puits majeur de CO : sa réaction avec le radical OH. Cependant, la répartition de ce radical et sa concentration moyenne globale sur un cycle diurne varient. Les écarts à la valeur moyenne de la concentration du radical OH que nous avons utilisée peuvent être importants, diminuant ou augmentant d'autant le temps de vie du CO. Nous avons donc mené deux tests de sensibilité : un temps de vie de moitié inférieur, soit un mois en moyenne, ainsi qu'un temps de vie infini. Les profils obtenus sont montrés sur la figure V.2.10 (a) et les écart-types associés sur la figure V.2.10 (b).

La concentration obtenue dans la simulation où le temps de vie moyen est de un mois est toujours inférieure à la concentration dans la simulation de référence. Malgré un temps de vie moitié moins long du CO, la concentration reste sur-estimée dans les basses couches. Cela suggère une sur-estimation des émissions et/ou un effet de cumul dans la couche limite dans le modèle et/ou à une sous-estimation du transport vertical. Remarquons qu'un temps de vie de un mois dans les basses couches est tout à fait raisonnable et permet ici une amélioration des résultats. Au dessus de 1.5 km à l'inverse, la concentration est globalement sous-évaluée, en particulier au dessus de 10 km. La forme en C est moins marquée que dans la simulation de référence. Dans l'expérience réalisée avec un temps de vie infini, la concentration est sur évaluée sur l'ensemble du profil et la forme en C est bien marquée. L'augmentation en altitude est due à deux facteurs principaux : d'une part une augmentation de la concentration dans les basses couches, qui augmente la quantité transporté dans la haute troposphère, et d'autre part l'augmentation au cours du temps du CO dans la haute troposphère puisque le temps de vie est infini. Cette expérience donne une borne supérieure de la concentration dans la simulation. En particulier, la concentration dans la haute troposphère est supérieure à la concentration mesurée par le Falcon. Cela signifie que si le temps de vie de CO dans la haute troposphère est plus long que ce que nous avons introduit, le modèle est susceptible d'atteindre de plus fortes valeurs dans la haute troposphère. Il est en effet possible que le temps de vie du CO dans la haute troposphère soit plus important que celui que nous avons utilisé dans la simulation de référence.

La variabilité de la concentration est moins affectée par le temps de vie en dessous d'environ 4 km. Les différences sont plus sensibles à partir de cette altitude. Dans la simulation où le temps de vie du CO est de moitié plus court, la variabilité est globalement inférieure à la variabilité de la concentration dans la simulation de référence, avec de plus une tendance à diminuer légèrement avec l'altitude. Dans la simulation où le temps de vie est infini, la variabilité est supérieure à la variabilité de la concentration dans la simulation de référence et augmente fortement à partir d'environ 5 km. Elle a tendance à augmenter avec l'altitude, se rapprochant de la variabilité du Falcon au dessus de 12 km. C'est dans l'expérience avec un temps de vie infini que la concentration a la plus forte variabilité, montrant ainsi que la diminution chimique prise en compte dans le temps de vie tend à uniformiser la distribution spatial du CO.

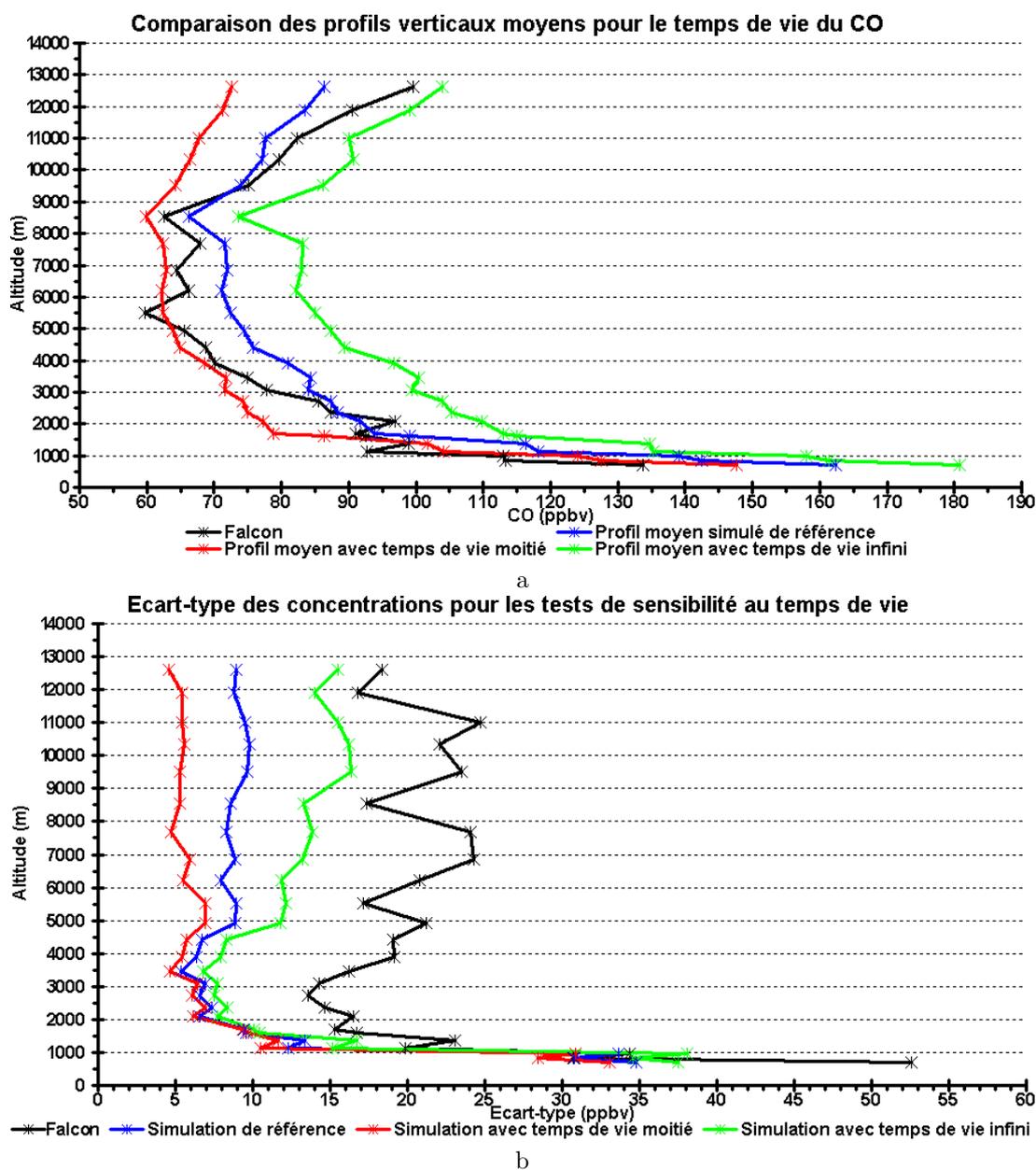


FIG. V.2.10 – Profils moyens mesuré et simulés avec différents temps de vie (a) et écart-types associés (b).



---

---

CHAPITRE VI

---

Premiers tests du modèle  
C-CATT-BRAMS

---

**Table des matières**

---

<b>VI.1 Description de la simulation . . . . .</b>	<b>171</b>
<b>VI.2 Analyse des résultats météorologiques . . . . .</b>	<b>173</b>
VI.2.1 Taux précipitants . . . . .	173
VI.2.2 Comparaison aux radio-sondages . . . . .	179
VI.2.3 Comparaison aux mesures de $\mu$ -SDLA . . . . .	189
VI.2.4 Mesures aéroportées . . . . .	190
<b>VI.3 Analyse des résultats chimiques . . . . .</b>	<b>194</b>
VI.3.1 Comparaison aux sondes ozones . . . . .	194
VI.3.2 Comparaison aux mesures aéroportées . . . . .	198
<b>VI.4 Conclusion . . . . .</b>	<b>206</b>

---

Nous analysons ici les résultats des premiers tests du modèle C-CATT-BRAMS dans le cadre d'une simulation en saison convective. La simulation réalisée ici est de quatre jours entre les 11 et 15 février 2004 pendant la période des campagnes coordonnées des projets TROCCINOX-HIBISCUS-TROCCIBRAS. Après avoir décrit la simulation, nous analysons les résultats météorologiques, puis les résultats chimiques.

## VI.1 Description de la simulation

La période simulée s'étend du 11 février à 00 *UTC* au 15 février 2004 à 00 *UTC* au cours de la période convective au Brésil. Cette période a été étudiée par Durry *et al.* (2006) et Marécal *et al.* (2007) dans le cadre du projet HIBISCUS. La simulation est faite avec deux grilles imbriquées. La grille 1 couvre la majeure partie de l'Amérique du Sud, avec une résolution spatiale horizontale de 50 *km*, comme lors de l'étude sur le transport de CO. Le domaine est un peu décalé vers le sud-est. La grille 2 couvre la région affectée par les émissions de São Paulo et de Rio de Janeiro, avec une résolution spatiale horizontale de 10 *km*. Elle inclut la zone des mesures effectuées par le Falcon lors de la période simulée, ainsi que Bauru d'où sont lancés les radio-sondages et les sondes ozone. Les champs de topographie correspondants sont montrés sur la figure VI.1.1. Il est à noter que la topographie a été lissée de manière plus importante que lors de la simulation avec traceurs.

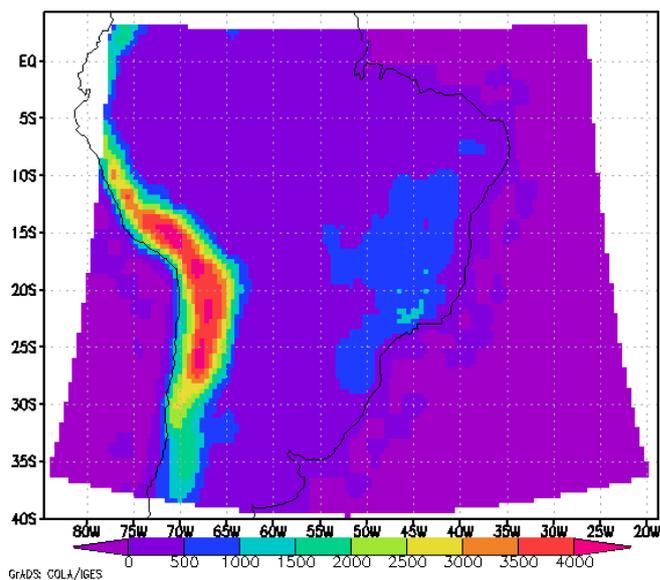
Pour les deux grilles, 63 niveaux verticaux sont utilisés, s'étendant du sol à environ 30 *km* d'altitude. L'épaisseur des couches dans la basse et moyenne troposphère augmente progressivement de 100 *m* à la surface jusqu'à 1 *km* vers 5 *km* d'altitude, puis décroît progressivement jusqu'à environ 9.5 *km* où la résolution reste fixée à 250 *m* jusque environ 15 *km* d'altitude. Cela permet une résolution verticale fine dans la haute troposphère, ce qui est très important pour la convection et le transport d'espèces, comme l'a montré Arteta *et al.* (2008b). L'épaisseur des couches augmente ensuite progressivement jusqu'à atteindre 1 *km* de résolution à partir de 19 *km* d'altitude jusqu'au sommet du modèle. Le pas de temps sur la grille 1 est de 40 *s* et de 13.33 *s* sur la grille 2. L'archivage est fait à une fréquence horaire.

L'importance du choix de la fermeture a été étudiée par Arteta *et al.* (2008a). Pour des conditions similaires de résolution, d'initialisation et de forçage aux limites, Arteta *et al.* (2008a) ont montré que la fermeture « ensemble » fournissait les meilleurs résultats météorologiques. L'initialisation et le forçage des champs météorologiques sont faits à partir des analyses du CEPMMT. Le forçage s'étend un peu plus vers l'intérieur du domaine avec un temps de relaxation plus important d'environ un facteur 2 que dans la simulation avec traceurs. Une couche d'amortissement a été utilisée au dessus de 24 *km* d'altitude avec un temps de relaxation également plus élevé.

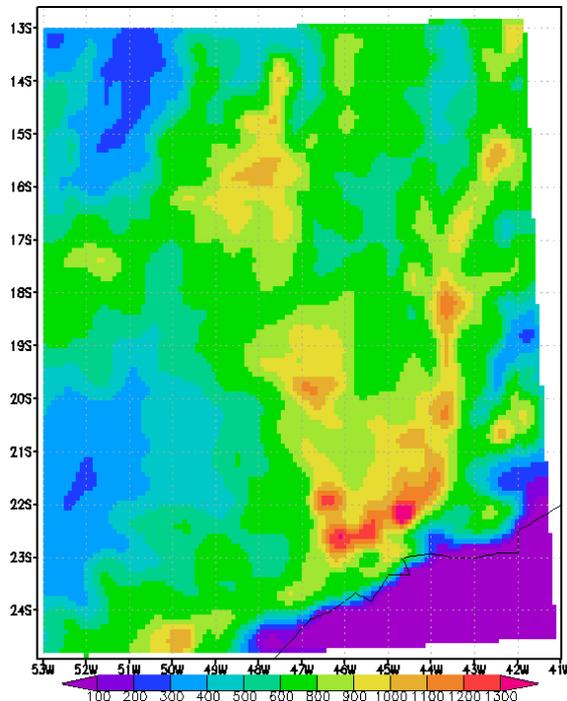
Pour la partie météorologique, les paramétrisations utilisées sont les mêmes que dans le chapitre précédent : schémas de Grell pour la convection retreinte et pour la convection profonde, effet « plume-rise », schéma de Walko *et al.* (1995) pour la microphysique et schéma radiatif de CARMA. Il est à noter que la fermeture utilisée dans le schéma de Grell pour la convection profonde est la fermeture « ensemble », comme dans la configuration opérationnelle.

Pour la partie chimique, l'initialisation et le forçage sont faits à partir des données de MOCAGE-Clim fournies par H. Teyssède du Centre National de Recherches Météorologiques (CNRM), les données opérationnelles du modèle MOCAGE n'étant pas disponibles avant juin 2005. Le solveur

utilisé est le solveur RODAS3, à pas de temps dynamique. Les modules de production de  $NO_x$  par les éclairs, de lessivage dans la convection paramétrisée et de dépôt sec ont également été utilisés. Les émissions utilisées sont les émissions originales de RETRO pour les émissions anthropiques, du modèle 3BEM pour les feux de biomasse et de POET pour les émissions biogéniques.



a



b

FIG. VI.1.1 – Champ de topographie (en mètres) utilisé sur la grille 1 (a) et sur la grille 2 (b) lors de la simulation. La grille 2 est imbriquée dans la grille 1.

## VI.2 Analyse des résultats météorologiques

Dans cette partie, nous analysons les résultats météorologiques de la simulation avec chimie. La simulation étant courte, nous n'analysons pas statistiquement les résultats. Nous comparons soit aux produits journaliers, soit aux radio-sondages ou aux vols individuels. Nous disposons pour ces comparaisons des produits journaliers de GPCP et de TRMM, d'une quinzaine de radio-sondages lancés depuis Bauru, des mesures acquises lors du vol SF2 de  $\mu$ -SDLA et des mesures acquises lors des vols du Falcon du 13 et du 14 février 2004.

### VI.2.1 Taux précipitants

La comparaison des taux précipitants accumulés simulés aux données des produits de GPCP et de TRMM sur le domaine couvert par la grille 1 montre que le modèle est globalement en accord avec les observations (figure VI.2.1). Les bandes de précipitations liées à l'ITCZ et la SACZ sont reproduites par le modèle. Par rapport à la simulation avec traceurs, les précipitations sont nettement moins abondantes près des Andes. Elles sont à l'inverse nettement plus abondantes au-dessus du bassin amazonien. Cette amélioration provient principalement de plusieurs facteurs : le lissage plus important de la topographie et l'utilisation des analyses du CEPMMT.

Sur le domaine couvert par la grille 2, l'accord entre le modèle et les produits journaliers est également bon. Les variations journalières sont présentes dans le modèle et les maxima sont assez bien localisés (figures VI.2.2 à VI.2.5). Cependant, l'intensité des précipitations est sur-estimée par le modèle. Les précipitations de forte amplitude ne sont pas sur-estimées par le modèle, à l'exception d'un maximum sur-estimé par le modèle le 11 février, centré sur  $-52.5^{\circ}\text{E}$  et  $-16.5^{\circ}\text{N}$ . La sur-estimation vient des précipitations de faible amplitude, significativement plus abondantes dans le modèle que dans les observations. Cette différence peut être partiellement attribuée à une mauvaise estimation de ces faibles précipitations dans les produits de GPCP et de TRMM. Il convient également de remarquer que la journée du 13 février est la journée pour laquelle les précipitations sur la grille 2 sont les moins bien reproduites. Au cours de cette journée, plusieurs autres séries de mesures ont été effectuées et sont discutées par la suite.

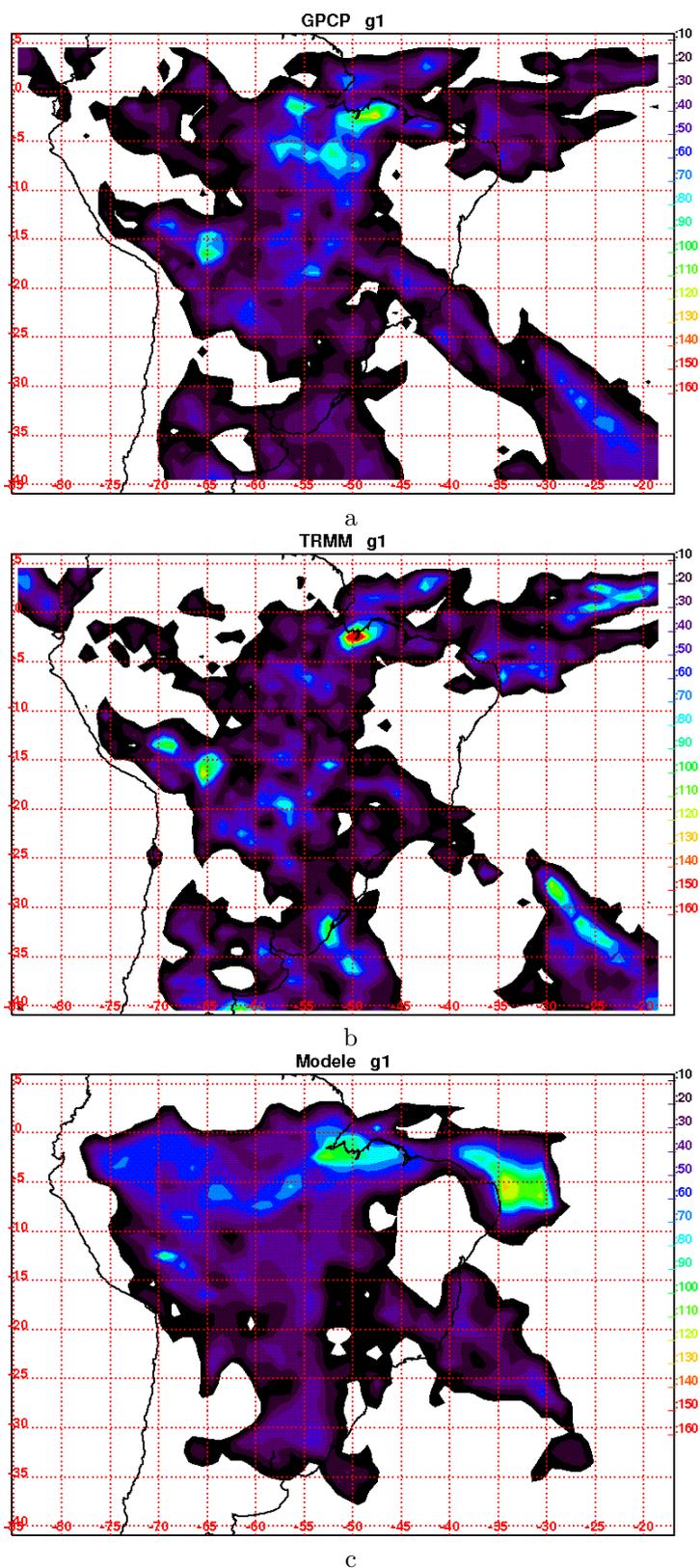


FIG. VI.2.1 – Précipitations accumulées (mm) entre le 11 février à 00 UTC et le 15 février à 00 UTC, estimées à partir d'observations (GPCP (a) et TRMM (b)) et simulées (c) sur la grille 1 et sur la période simulée.

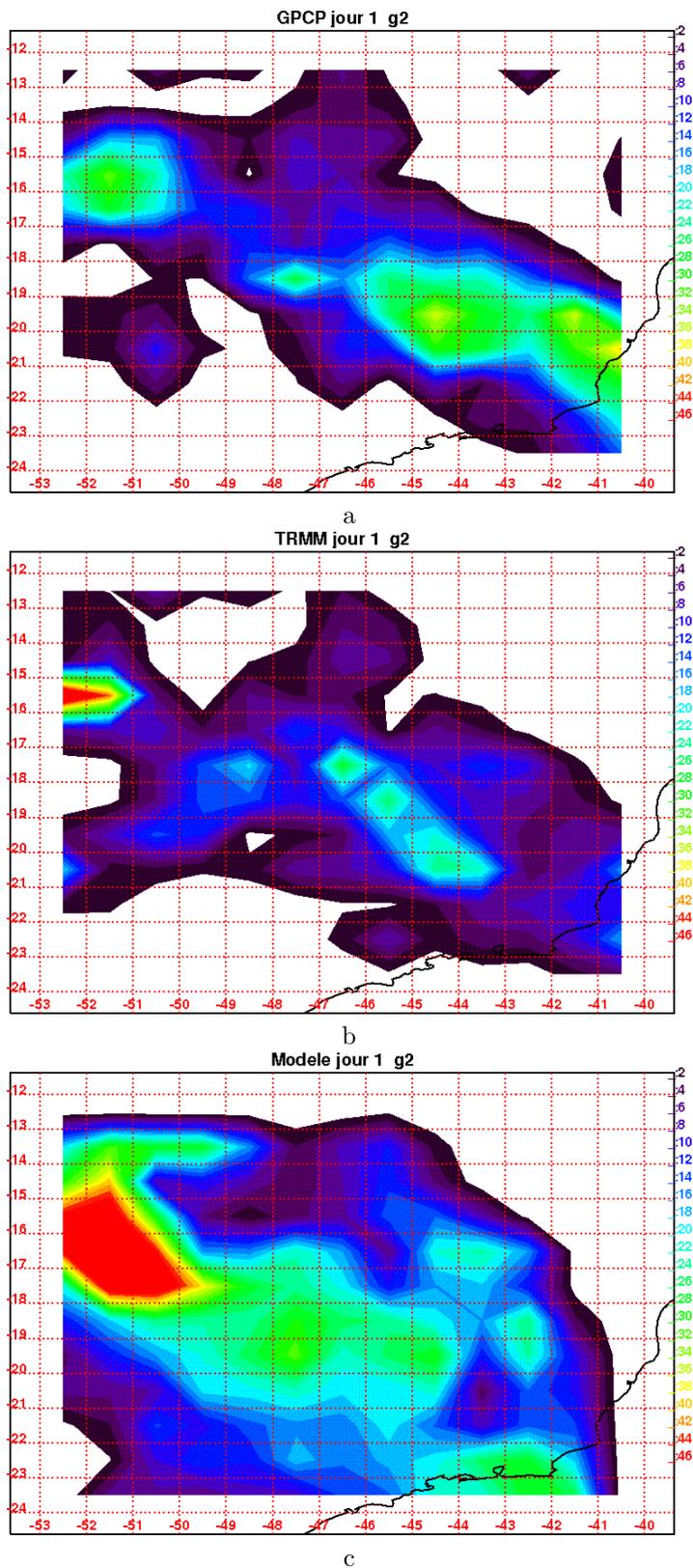


FIG. VI.2.2 – Précipitations accumulées (mm) estimées à partir d'observations (GPCP (a) et TRMM (b)) et simulées (c) sur la grille 2 pour la journée du 11 février 2004.

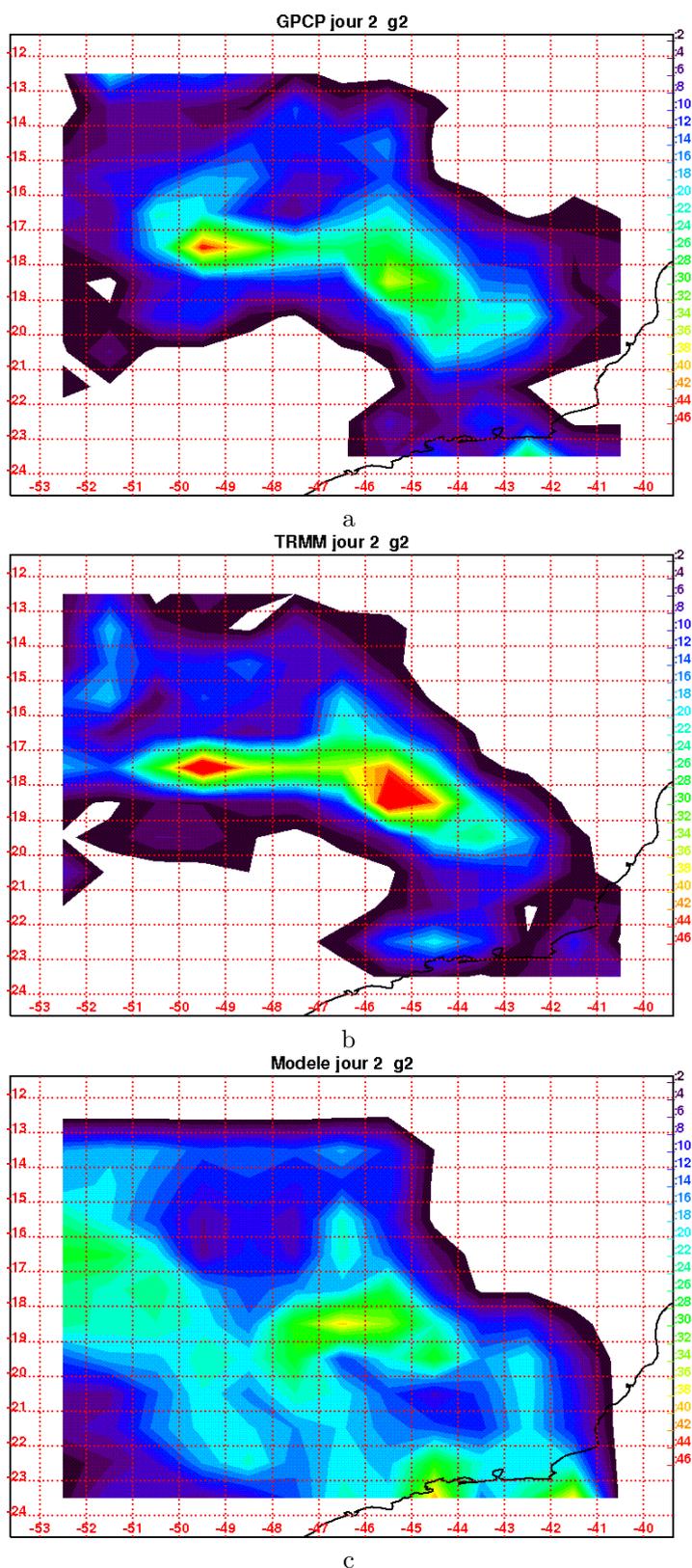


FIG. VI.2.3 – Figure similaire à la figure VI.2.2 pour la journée du 12 février 2004.

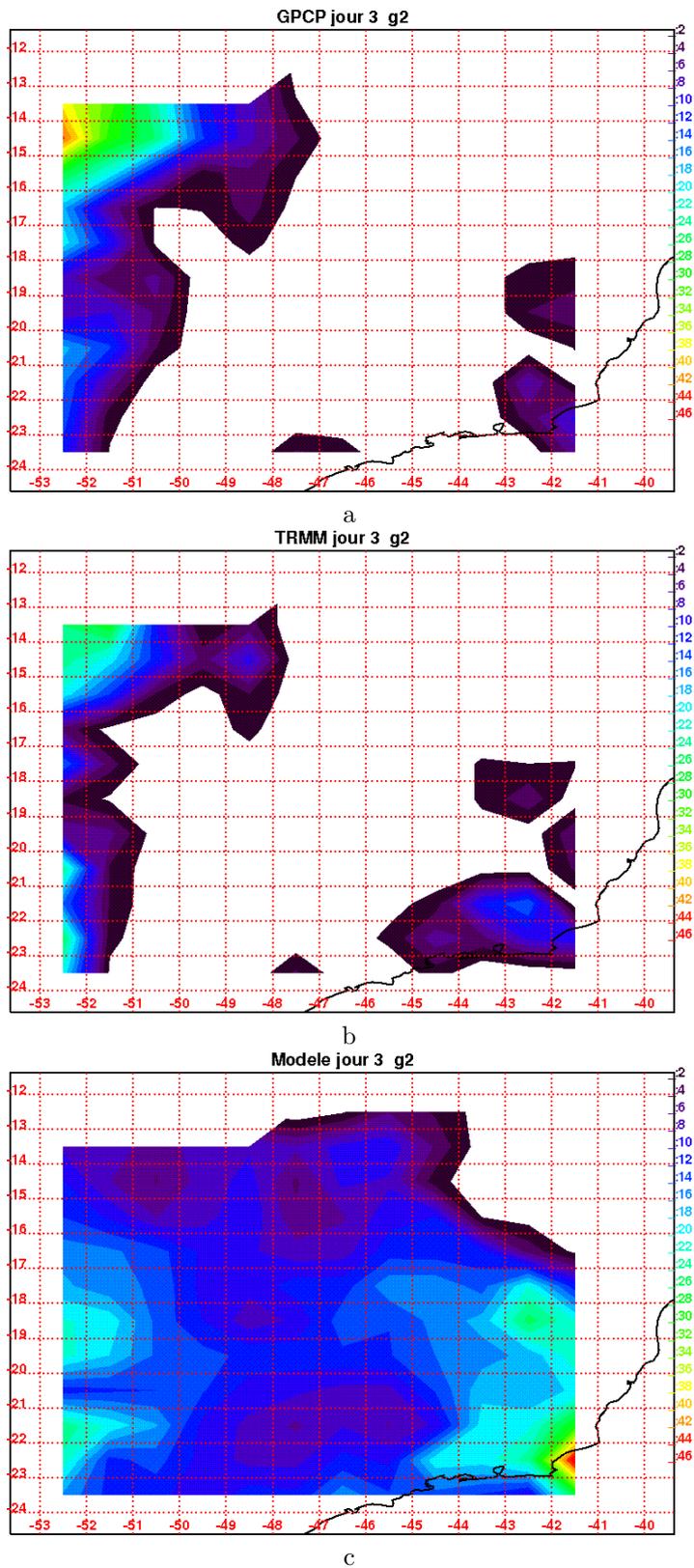


FIG. VI.2.4 – Figure similaire à la figure VI.2.2 pour la journée du 13 février 2004.

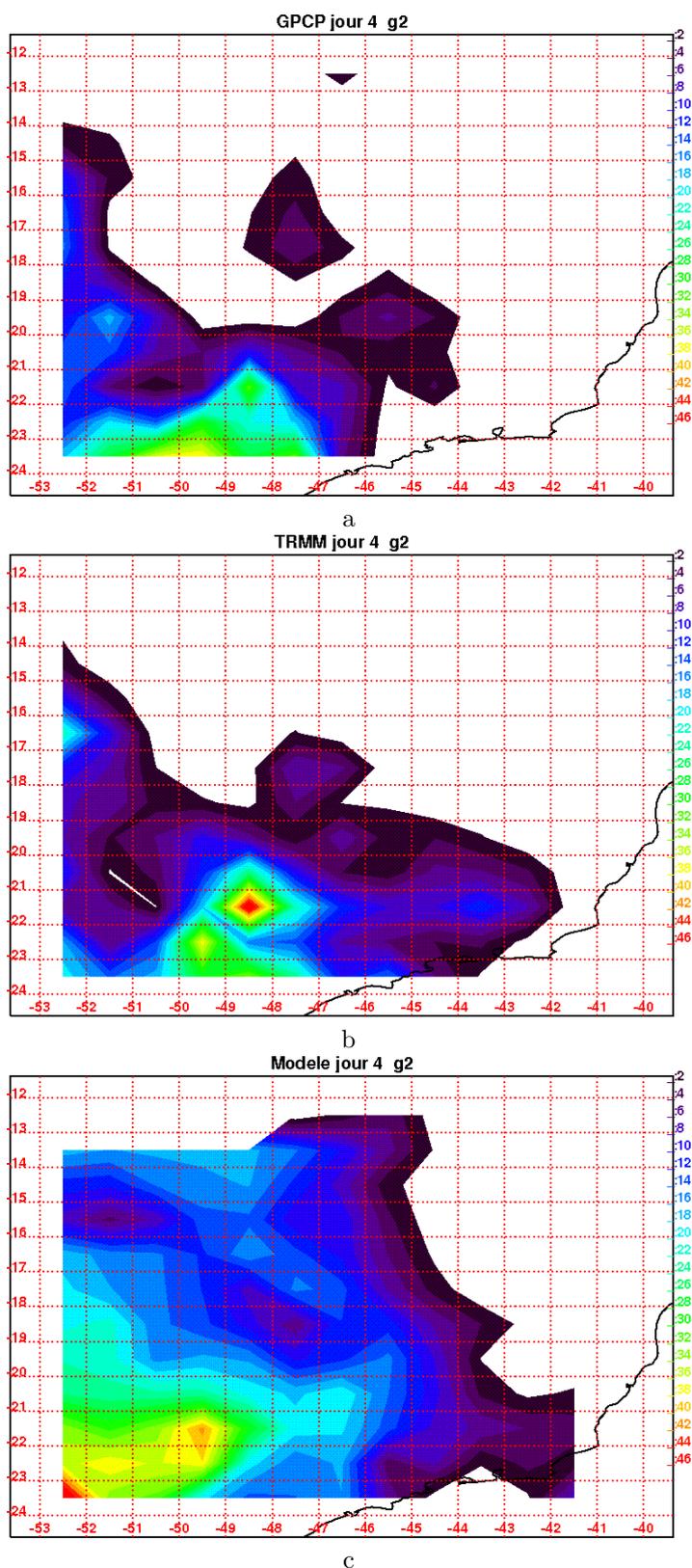


FIG. VI.2.5 – Figure similaire à la figure VI.2.2 pour la journée du 14 février 2004.

## VI.2.2 Comparaison aux radio-sondages

Sur la période simulé, nous disposons de 16 radio-sondages lancés depuis Bauru. Nous illustrons la comparaison pour les radio-sondages correspondant au moment de l'initialisation et des mesures par sondes ozones ou aéroportées. Les profils verticaux simulés et observés de température, de vitesse et de direction du vent sont montrés sur les figures VI.2.6 à VI.2.14.

La figure VI.2.6 montre les profils verticaux issus de l'état initial du modèle et ceux mesurés. On constate que l'accord est correct, montrant ainsi que l'état initial utilisé est cohérent avec les observations. La figure VI.2.8 correspond à l'instant des mesures par la sonde ozone du 11 février en fin de journée. On peut voir que l'état météorologique au dessus de Bauru est correctement reproduit par le modèle. Par contre, on peut noter que le 11 février à 18 *UTC*, la direction du vent est moins bonne dans les basses couches. Les figures VI.2.10 à VI.2.11 permettent de comparer les résultats du modèle à ceux des radio-sondages pour la journée du 13 février au cours de laquelle a été lancée la deuxième sonde ozone et au cours de laquelle le Falcon a effectué un vol. Les radio-sondages sont globalement bien reproduits par le modèle, à l'exception de la direction du vent près de la surface à 12 et 18 *UTC*. En particulier, l'évolution journalière des grandeurs est suivie par le modèle. Les figures VI.2.12 à VI.2.14 permettent une comparaison similaire à la précédente pour la journée du 14 février au cours de laquelle le Falcon a effectué un vol. L'accord entre le modèle et les radio-sondages est également bon pour la reproduction des champs météorologiques et de leur évolution journalière, y compris près de la surface.

La comparaison aux radio-sondages lancés depuis Bauru montre que le modèle reproduit correctement les champs météorologiques, ainsi que leur évolution journalière, hormis pour les basses couches pour la journée du 13 février 2004.

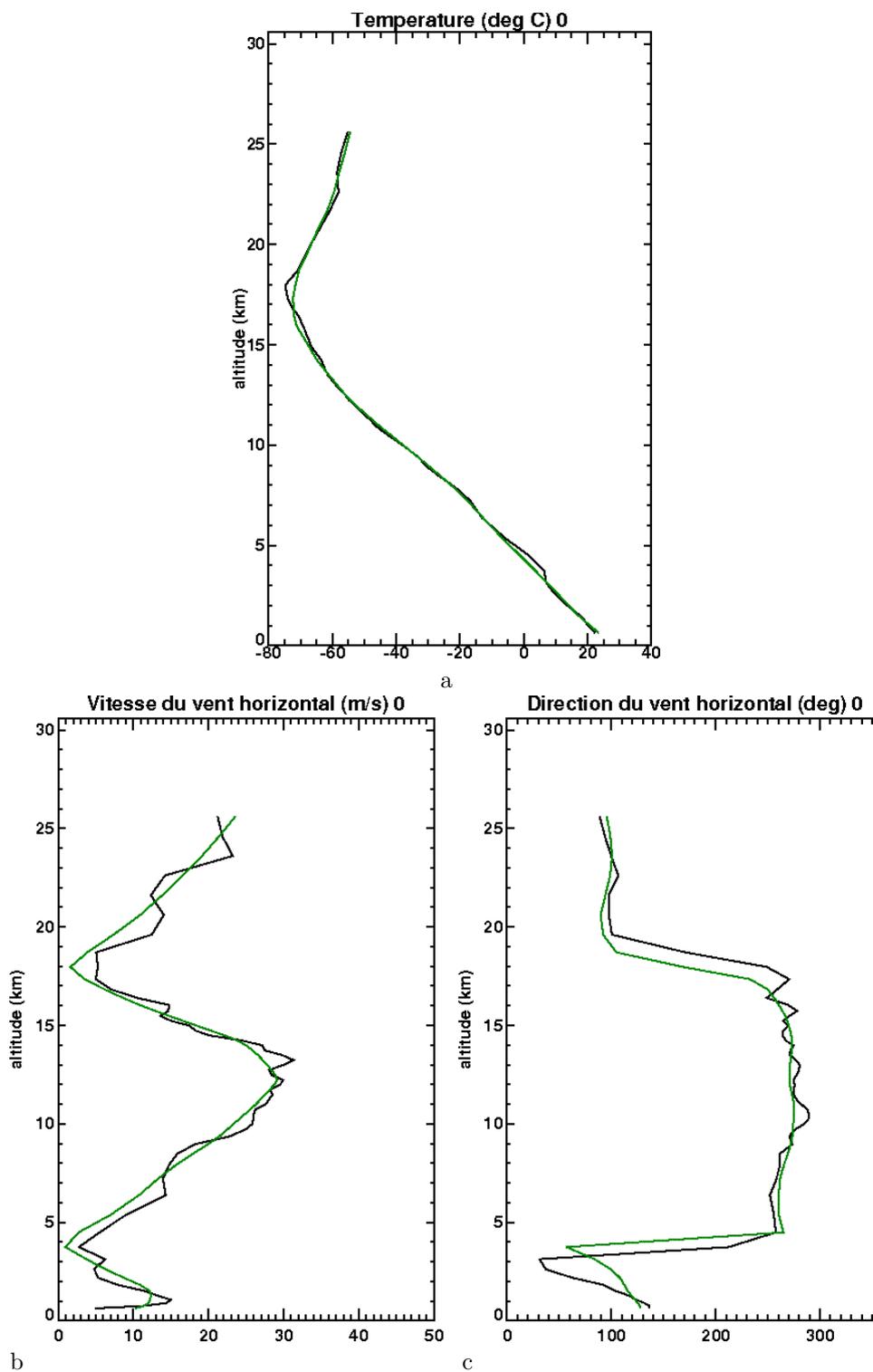


FIG. VI.2.6 – Profils verticaux de température (a), de vitesse (b) et de direction du vent (c) mesurés (courbes noire) et simulés (courbes vertes) le 11 février à 00UTC.

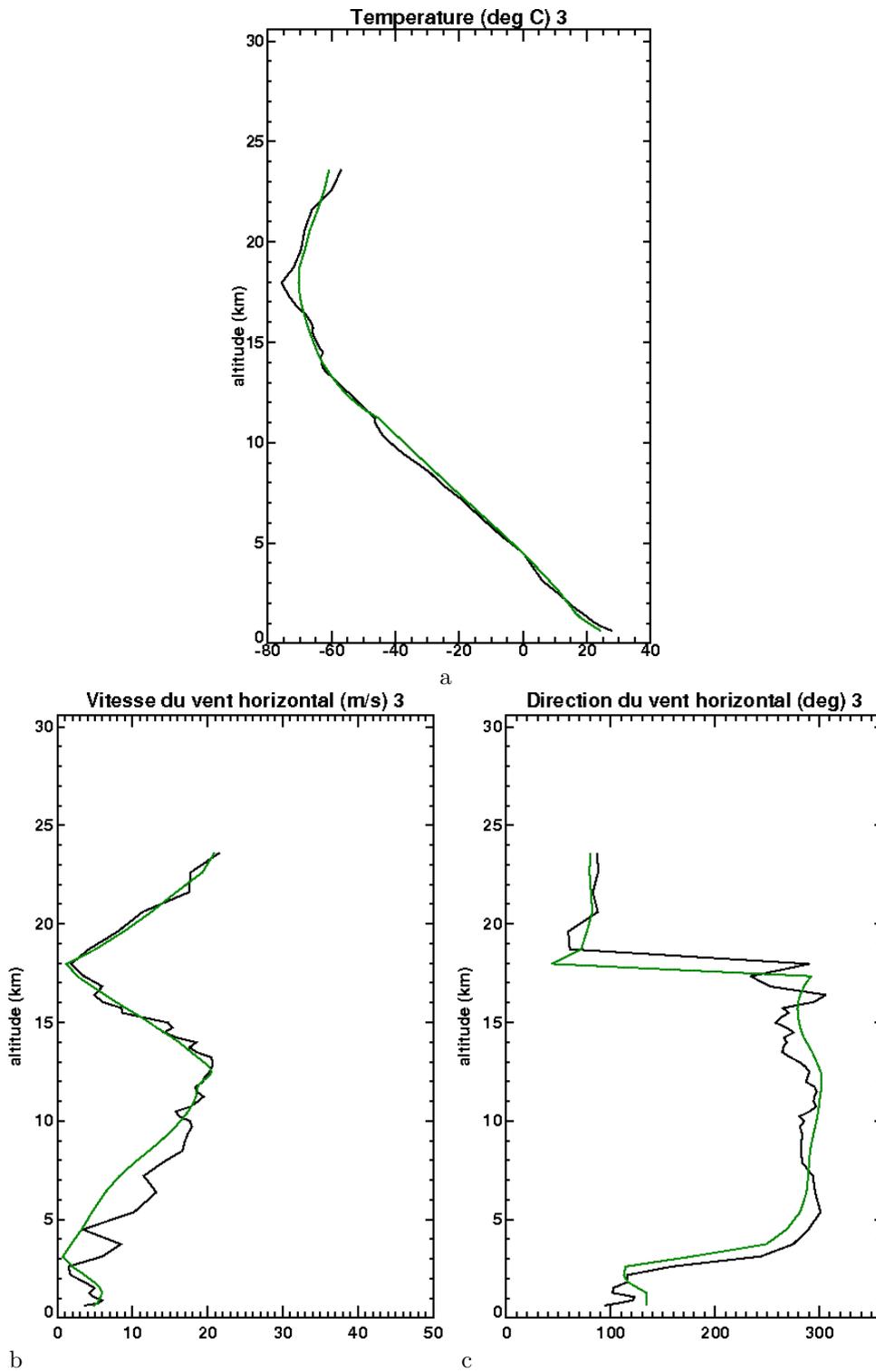


FIG. VI.2.7 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 11 février à 18UTC.

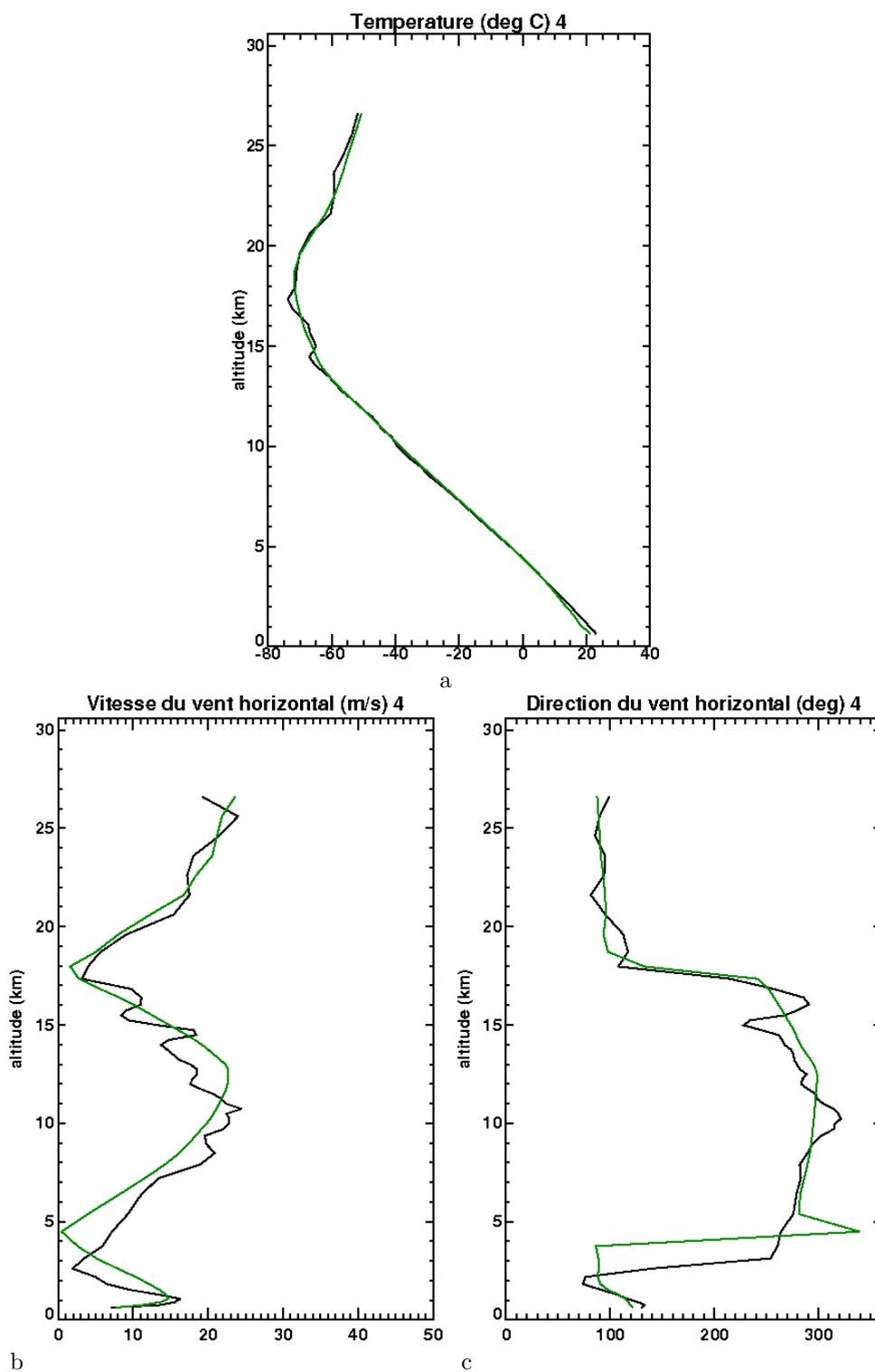


FIG. VI.2.8 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 12 février à 00UTC.

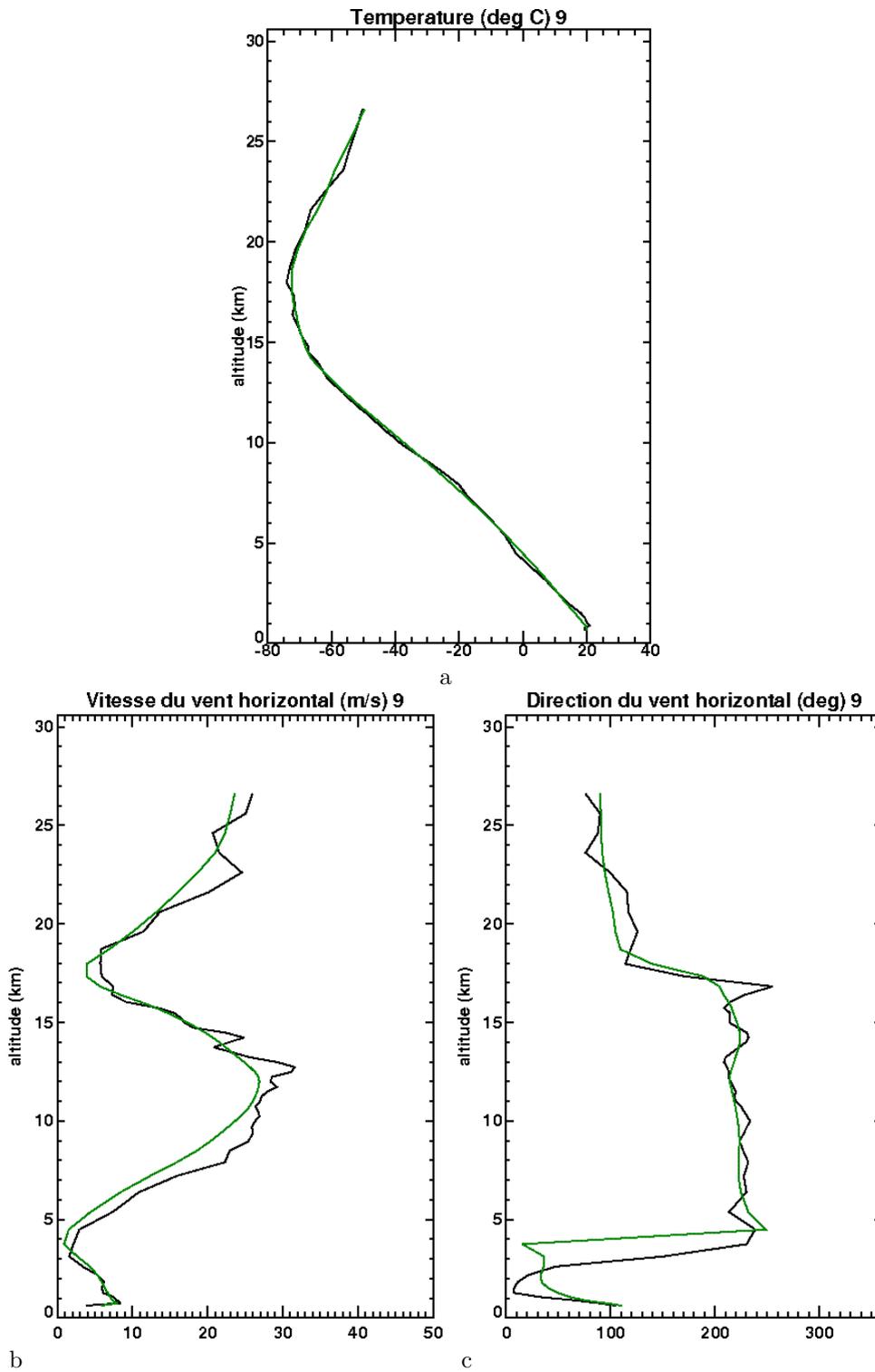


FIG. VI.2.9 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 13 février à 06UTC.

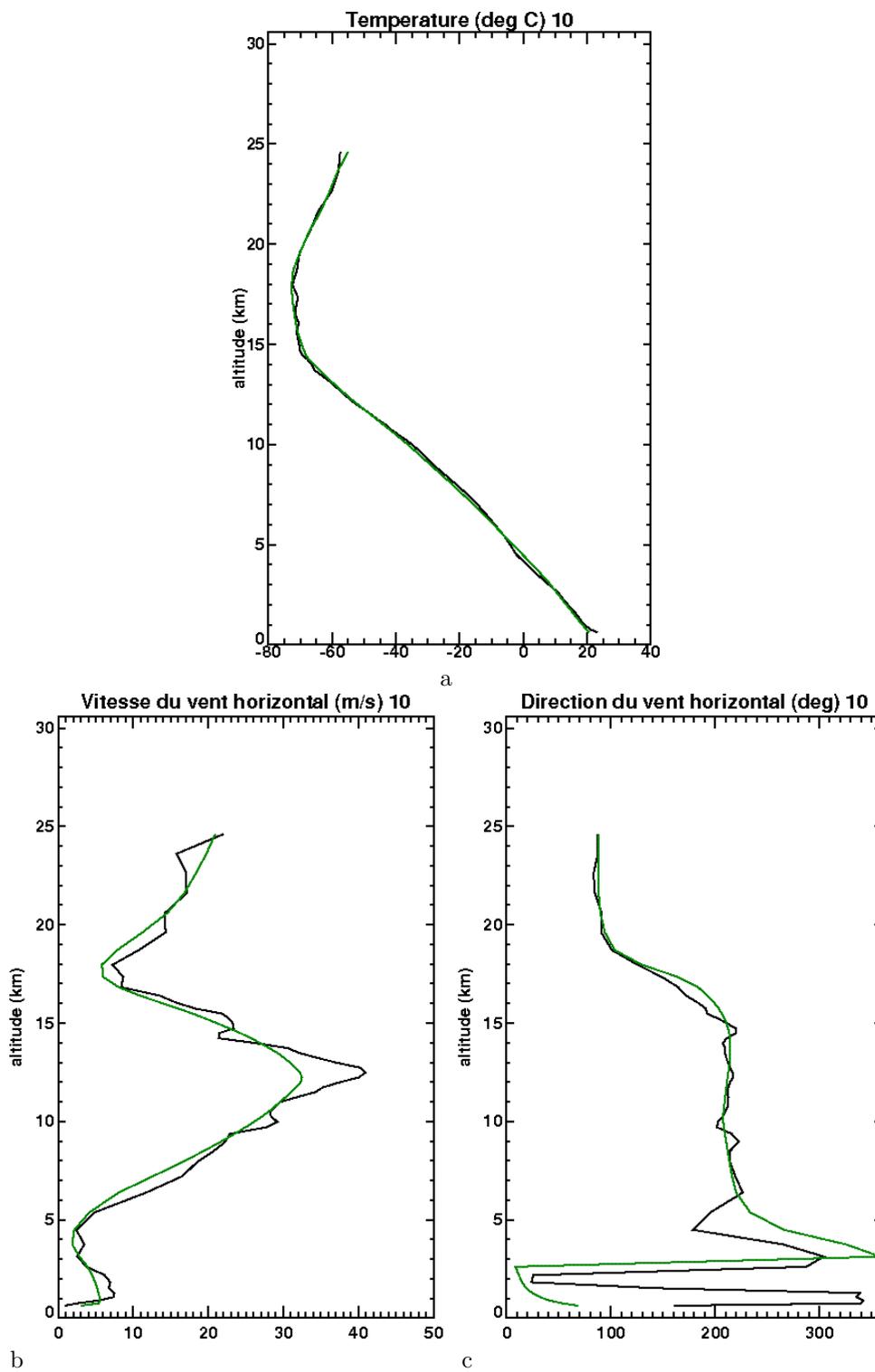


FIG. VI.2.10 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 13 février à 12UTC.

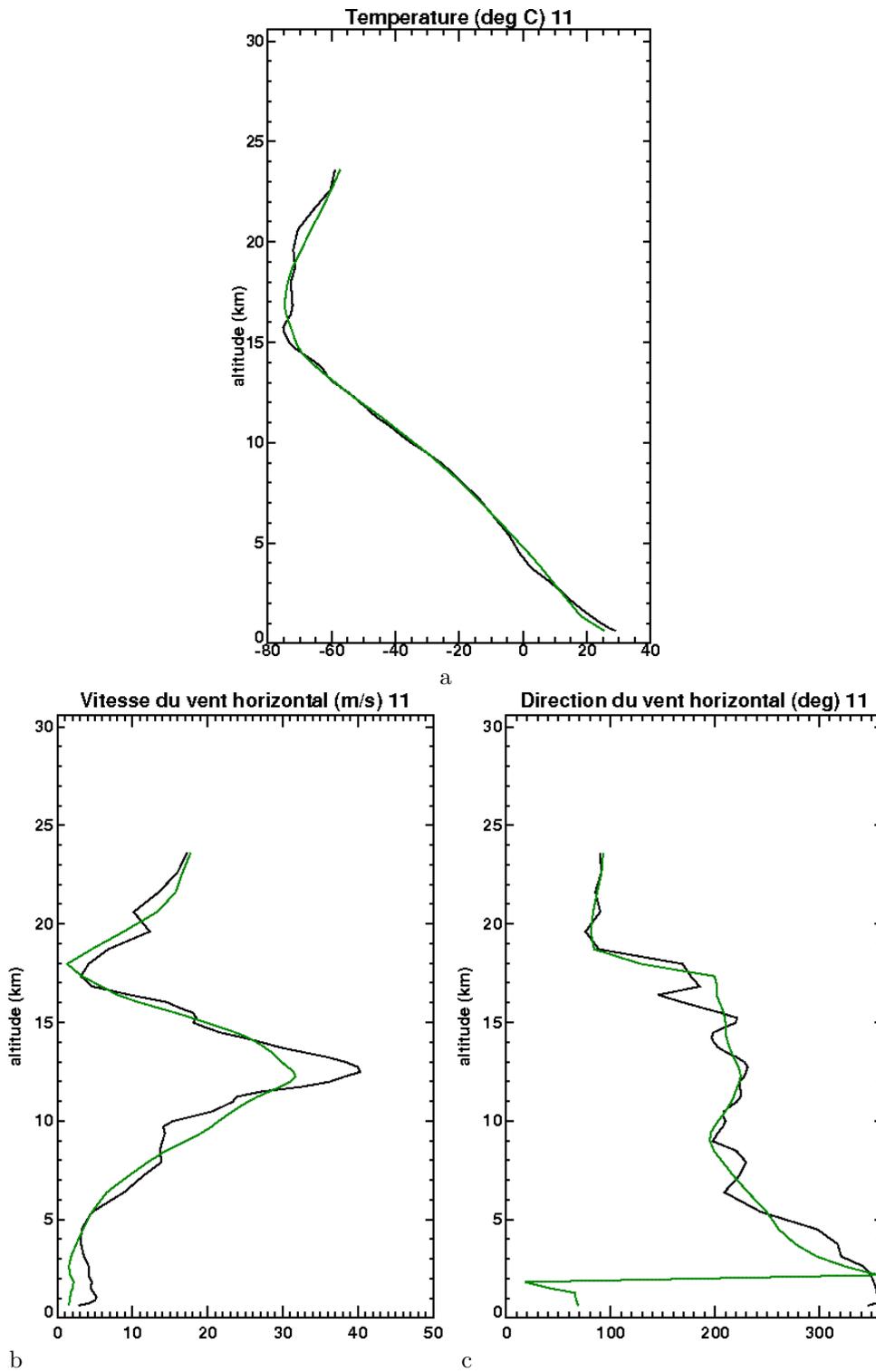


FIG. VI.2.11 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 13 février à 18UTC.

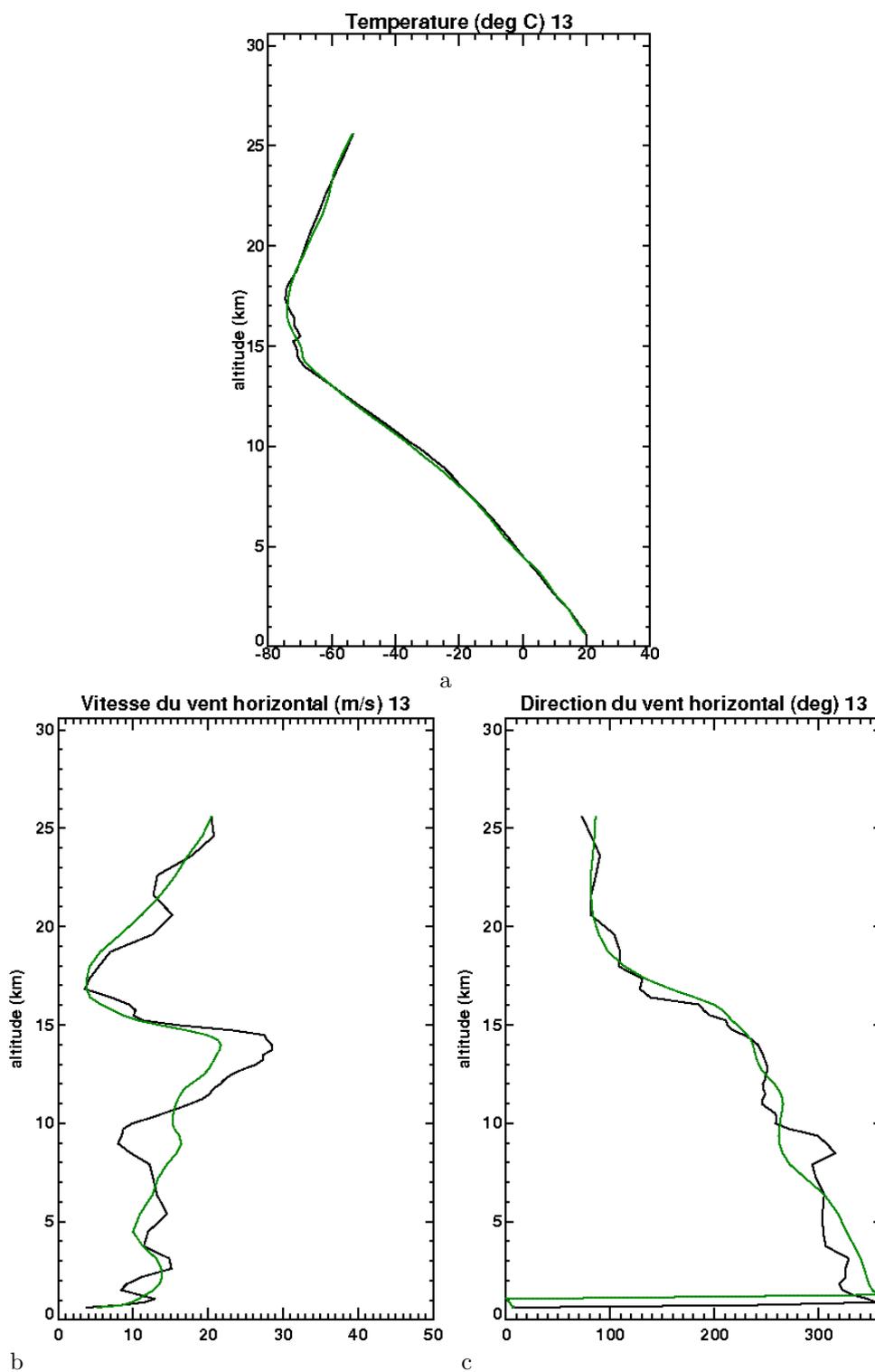


FIG. VI.2.12 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 14 février à 12UTC.

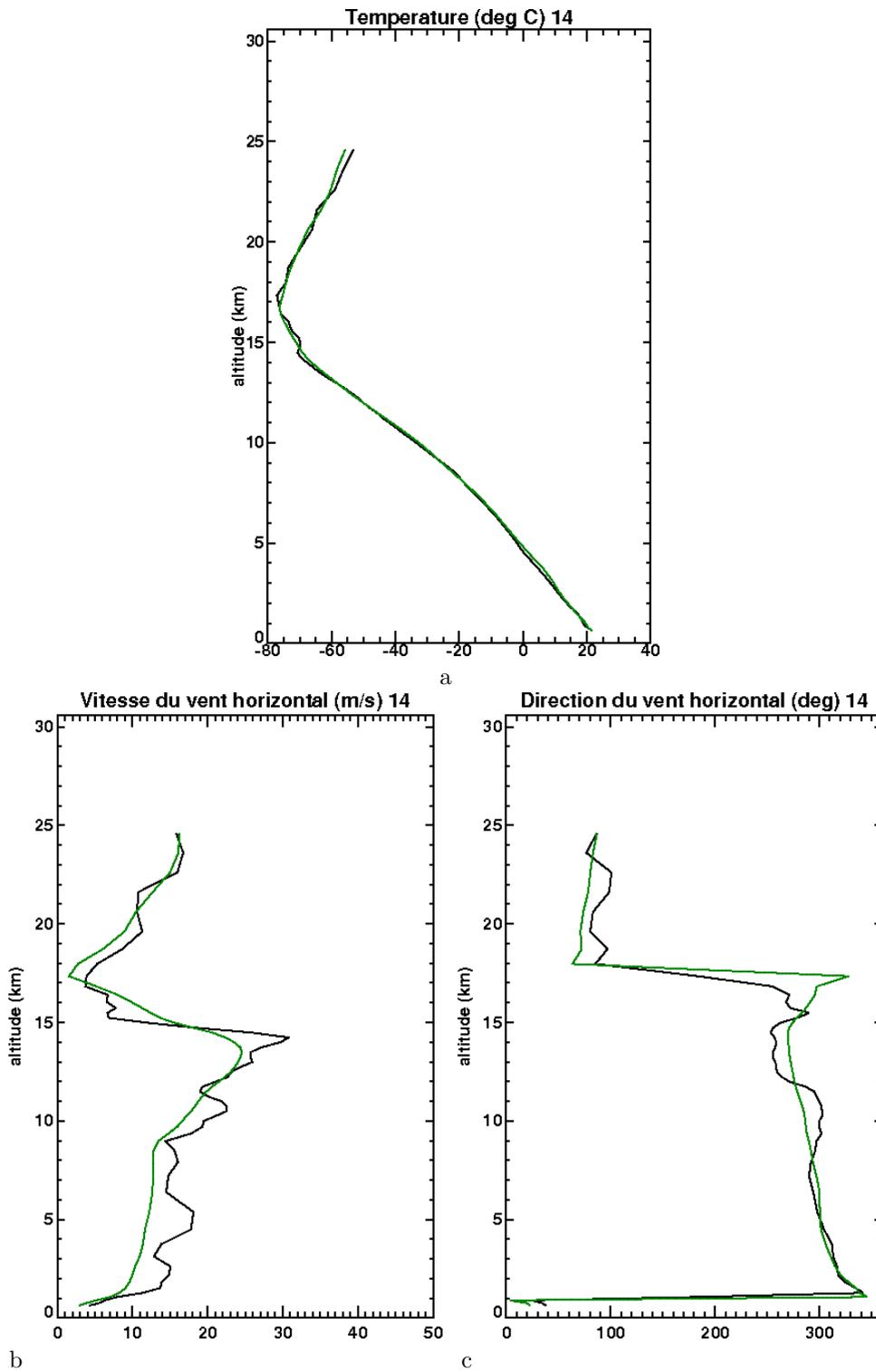


FIG. VI.2.13 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 14 février à 18UTC.

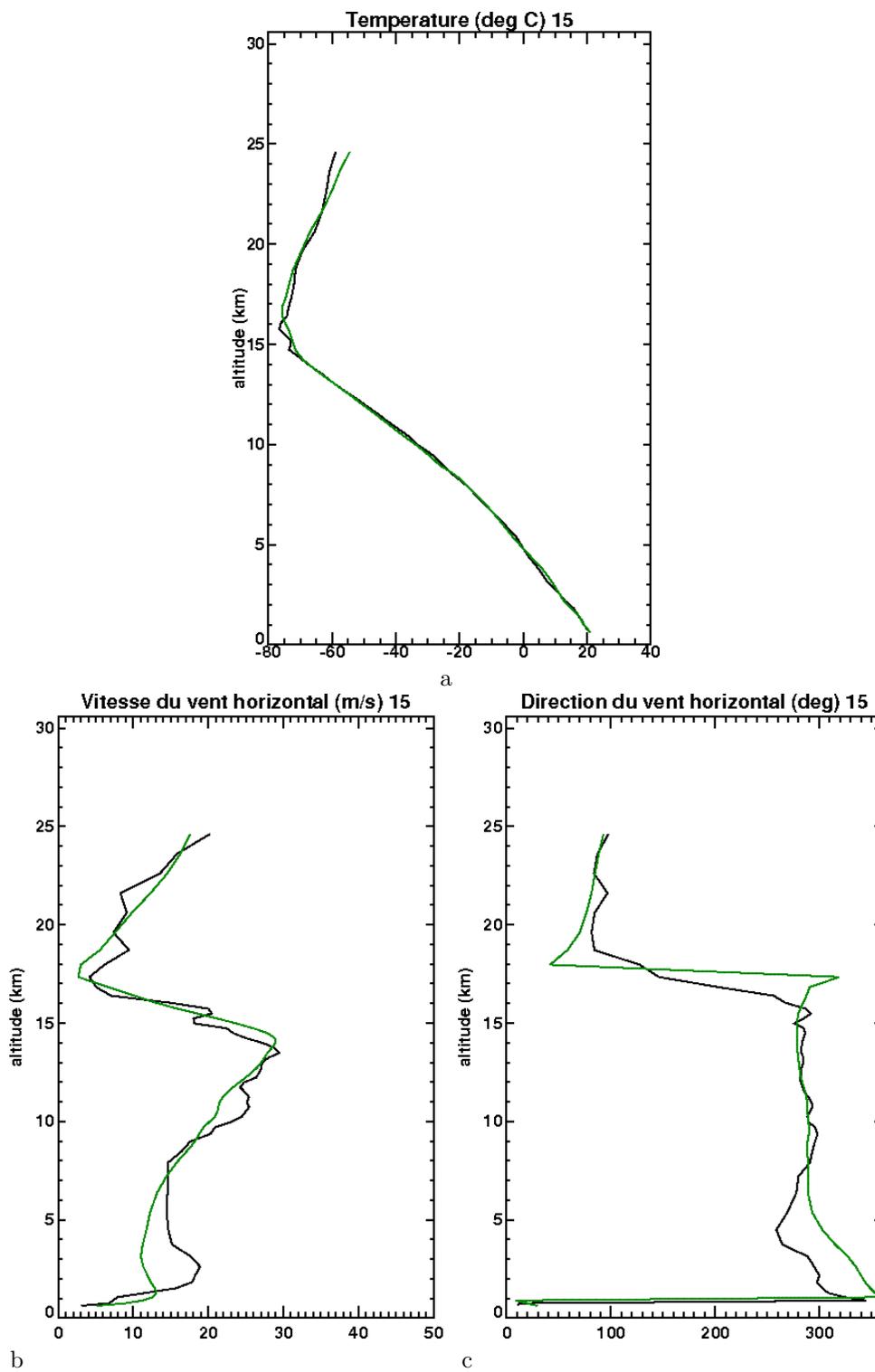


FIG. VI.2.14 – Figure similaire à la figure VI.2.6 pour le 15 février à 00UTC.

### VI.2.3 Comparaison aux mesures de $\mu$ -SDLA

Lors de la période simulée, un vol ballon de courte durée a été effectué dans le cadre de la campagne de 2004 associée au projet HIBISCUS (SF2). Le ballon a été lancé depuis Bauru à 20 : 18 *UTC* le 13 février 2004 avec à son bord l'instrument  $\mu$ -SDLA. L'altitude maximale atteinte était de 20 *km*. Le ballon a ensuite effectué une descente lente de 3 *h* durant la nuit jusqu'à l'altitude de 11.8 *km*, puis une descente rapide sous parachute. La situation météorologique était assez calme, avec quelques cellules convectives isolées et la propagation d'instabilités du nord-ouest vers l'ouest qui sont restées à plus de 300 *km* de la trajectoire du ballon. Plus de détails peuvent être trouvés dans Durré *et al.* (2006) et Marécal *et al.* (2007).

Les données utilisées proviennent de l'instrument  $\mu$ -SDLA sur la gamme d'altitude s'étendant de 4.6 *km* à 18.5 *km* (mesures à la descente). Les profils de température, de rapport de mélange en vapeur d'eau et d'humidité relative par rapport à la glace sont présentés sur la figure VI.2.15. Les données entre 12.774 *km* et 13.385 *km* d'altitude sont absentes suite à des problèmes techniques. Plus de commentaires concernant les profils mesurés sont donnés dans Durré *et al.* (2006) et Marécal *et al.* (2007). On constate que bien que le modèle sur-estime légèrement la température en dessous de 5 *km*, et bien que le point froid (à environ 15 *km* d'altitude) soit sur-estimé, l'accord entre le modèle et les observations est bon pour la température. La figure VI.2.15 (b) montre que le modèle sur-estime légèrement le rapport de mélange en vapeur d'eau dans la basse et moyenne troposphère, mais reste cependant proche des observations. De même, le modèle reproduit correctement l'humidité relative par rapport à la glace, à l'exception des deux fortes sursaturations à environ 13 et 15.5 *km* d'altitude. A 15.5 *km* d'altitude, cela provient de la sur-estimation de la température dans le modèle, le rapport de mélange en vapeur d'eau étant similaire aux observations. A 13 *km* d'altitude, le modèle fournit une sursaturation, mais dont l'intensité est moindre par rapport aux observations. Cela est dû au schéma microphysique qui ne permet pas de très fortes sursaturations.

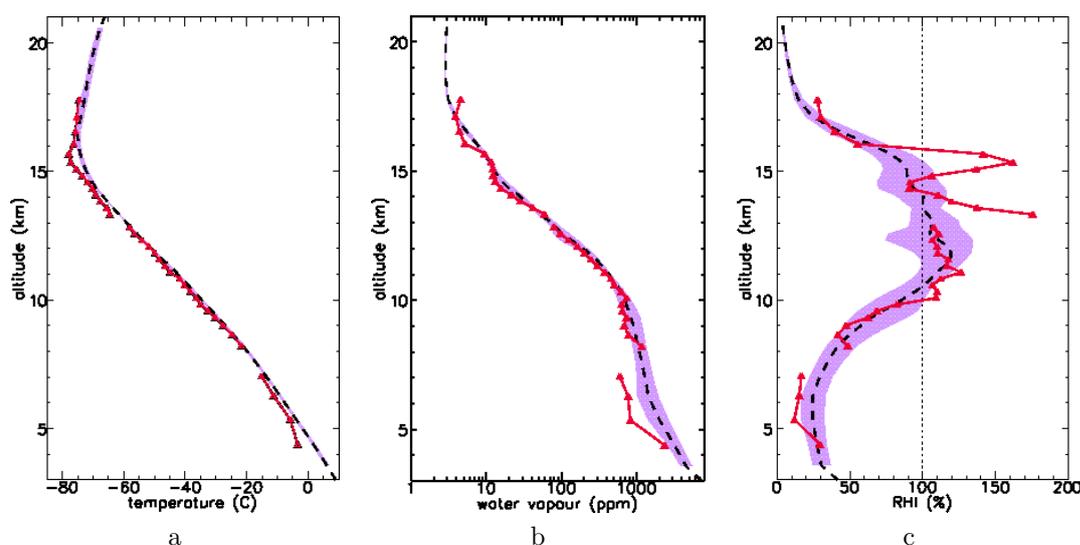


FIG. VI.2.15 – Comparaison entre les résultats de la simulation et les données de  $\mu$ -SDLA pour le vol SF2 et pour la température (a), le rapport de mélange en vapeur d'eau (b) et l'humidité relative par rapport à la glace (c). Les données moyennées sur les niveaux du modèle sont affichées en rouge, la ligne en pointillés noirs montre la valeur moyenne issue du modèle et la zone violette montre les minima et maxima pour chaque altitude. La moyenne du modèle est obtenue en prenant les profils verticaux autour de la trajectoire du ballon.

## VI.2.4 Mesures aéroportées

Sur la période simulée, les données recueillies lors de deux vols du Falcon sont disponibles. Ces deux vols sont ceux du 13 et du 14 février 2004. Nous comparons ici les résultats météorologiques du modèle avec chacun des deux vols effectués, la procédure pour obtenir les valeurs simulées le long des vols étant la même que dans la simulation avec traceurs.

### VI.2.4.1 Vol du 13 février

Pour ce vol, les comparaisons entre les résultats de la simulation et les données du Falcon sont montrées sur la figure VI.2.16. Le modèle reproduit très bien la température (figure VI.2.16 a). L'humidité spécifique (figure VI.2.16 b) est moins bien reproduite, en particulier en altitude, mais reste cependant proche des mesures. Le vent (figure VI.2.16 c et d) le long du vol du Falcon est bien reproduit par le modèle malgré une légère sous-évaluation générale de la vitesse du vent.

### VI.2.4.2 Vol du 14 février

Pour ce vol, les comparaisons entre les résultats de la simulation et les données du Falcon sont montrées sur la figure VI.2.16. Pour la température (figure VI.2.17 a), des données sont manquantes. On peut cependant voir que le modèle reproduit correctement les mesures. De même, pour l'humidité spécifique (figure VI.2.17 b), des données sont manquantes. On constate cependant que le modèle reproduit correctement les mesures malgré une sous-estimation au début du palier à 11.5 km. Comme pour le vol précédent, le vent (figure VI.2.17 c et d) est bien reproduit par le modèle.

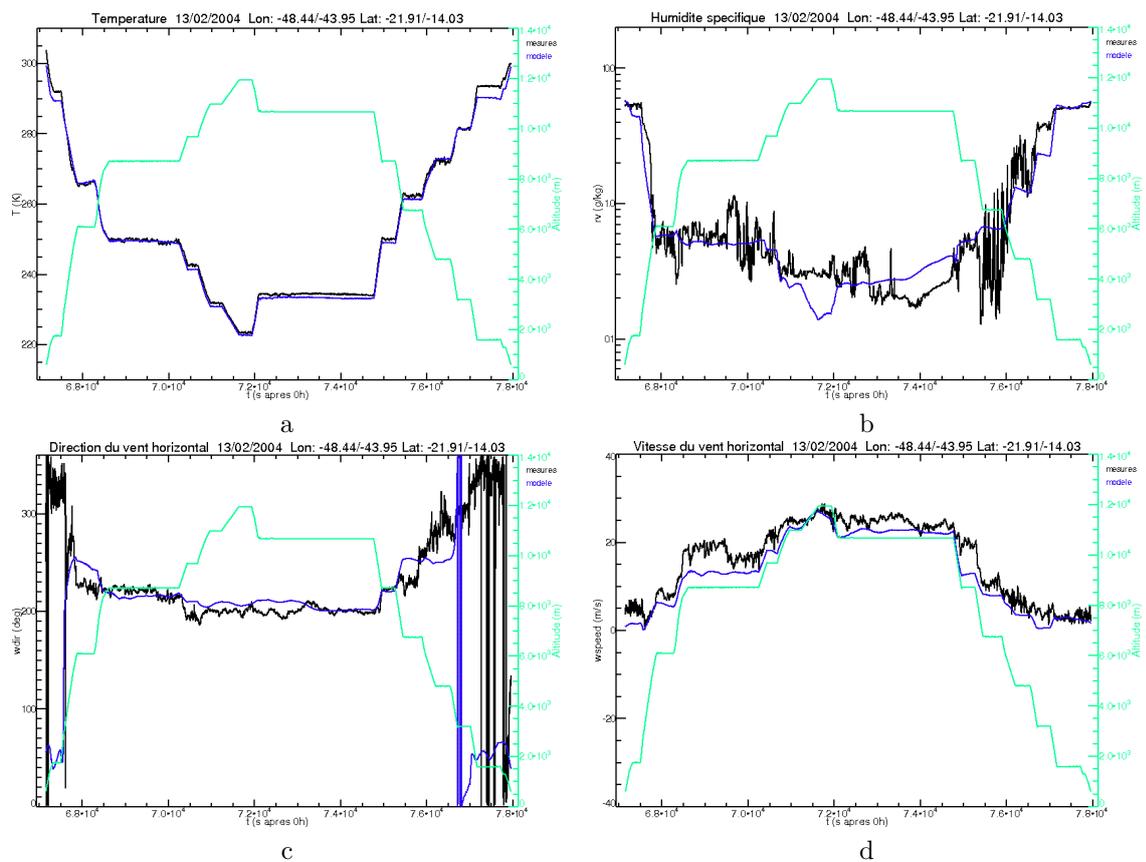


FIG. VI.2.16 – Température (a, en K), humidité spécifique (b, en g/kg), direction du vent (c, en °) et vitesse du vent (d, en m/s) acquises lors du vol du 13 février 2004 (courbes noires) et simulées (courbes bleues). La courbe verte donne l'altitude du Falcon.

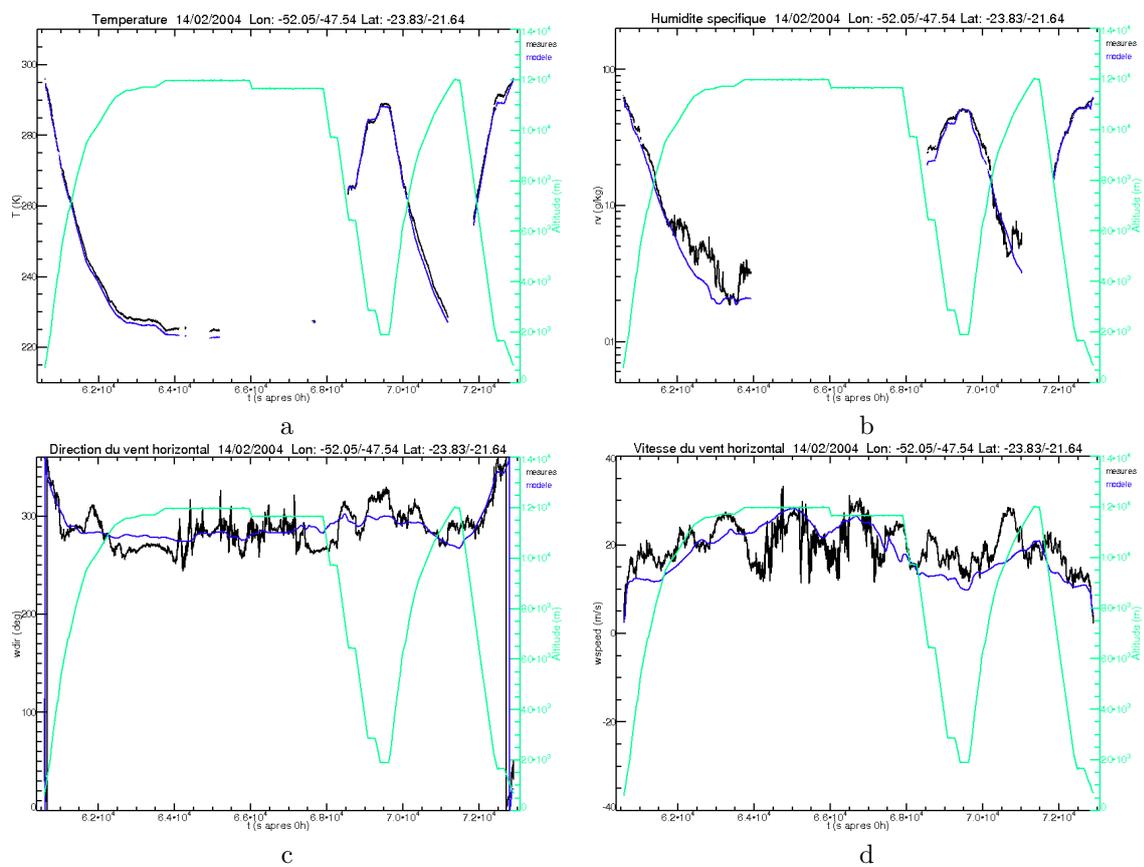


FIG. VI.2.17 – Figure similaire à la figure VI.2.16 pour le vol du 14 février 2004.

Dans l'ensemble, le modèle reproduit correctement les mesures météorologiques le long des vols.

## VI.3 Analyse des résultats chimiques

Pour l'analyse des résultats chimiques, nous disposons de mesures des sondes ozone et des mesures aéroportées de  $CO$ , de  $NO$  et d'ozone. Comme pour l'analyse des résultats météorologiques, c'est une comparaison cas par cas qui est faite. Cette analyse est préliminaire et devra être poursuivie ultérieurement. Elle permet néanmoins de dégager quelques pistes qui devront être explorées pour présenter une simulation et une analyse définitives de cette période.

### VI.3.1 Comparaison aux sondes ozones

La figure VI.3.1 permet de comparer les résultats de la simulation aux mesures effectuées à l'aide des sondes ozone lancées les 12 et 13 février 2004. Comme les résultats du modèle pour ces deux sondes ozone sont similaires, seul le sondage ozone du 12 est discuté.

En dessous de 2  $km$ , plus l'on se rapproche de la surface, plus la concentration en ozone augmente. Dans les mesures, c'est l'inverse : plus l'on se rapproche de la surface et plus la concentration en ozone est faible. Le pic de concentration observé à environ 2  $km$  est reproduit par le modèle, mais la diminution de la concentration avec l'altitude est plus faible dans le modèle que dans les observations. Aux environs de 5  $km$ , l'accord entre le modèle et les données est correct. Entre 5 et 11  $km$ , le modèle sur-estime légèrement plus qu'à 5  $km$  la concentration en ozone, puis à partir de 11  $km$  environ, l'accord entre le modèle et les mesures est de nouveau correct.

Concernant les différences entre modèle et observations en dessous de 2  $km$ , l'explication est la suivante. Les figures VI.3.2 a et b montrent le rapport de mélange de l'ozone et des  $NO_x$  au sol à 14  $UTC$  le 11 février. On observe d'importants rapports de mélange de ces deux espèces autour de São Paulo (-23.5°N, -47°E). Le 12 février à 01  $UTC$ , ces grands rapports de mélange ont été transportés (figures VI.3.3 a et b), avec amplification pour l'ozone, vers Bauru (-22.3°N, -49°E). Bien que la direction des vents soit correctement modélisée à Bauru au moment du sondage (figure VI.2.8), des différences entre le modèle et les observations sont visibles le 11 février à 18  $UTC$  (figure VI.2.7). Ceci indique que le modèle n'adecte probablement pas la zone de pollution provenant de São Paulo dans la bonne direction. Celle-ci passe sur Bauru dans la simulation et à côté dans la réalité. L'analyse des mesures de stations de surface entre São Paulo et Bauru (non disponibles) serait nécessaire pour confirmer cette interprétation. Ceci peut expliquer que la forte augmentation de l'ozone du modèle n'est pas observée dans le sondage ozone lancé à 23 : 57  $UTC$  depuis cette station.

La figure VI.3.4 montre le rapport de mélange de  $CO$  à 2  $km$  d'altitude à 01  $UTC$  le 12 février. Bauru se situe au voisinage d'un gradient de  $CO$  à cette altitude, révélant une zone de transport vertical depuis les basses couches par de la convection restreinte. Ce transport vertical se concrétise par une augmentation des  $NO_x$  et de l'ozone au dessus de Bauru (figures VI.3.5 et VI.3.6) vers 2  $km$  dans le modèle et dans les observations (figure VI.3.1). L'augmentation dans le modèle est plus forte en raison des fortes valeurs près de la surface. Ces fortes valeurs sont liées à la pollution de São Paulo adectée sur Bauru. Elles sont transportées verticalement par la convection restreinte. L'augmentation de l'ozone du modèle n'est pas observée dans le sondage ozone en dessous de 2  $km$ .

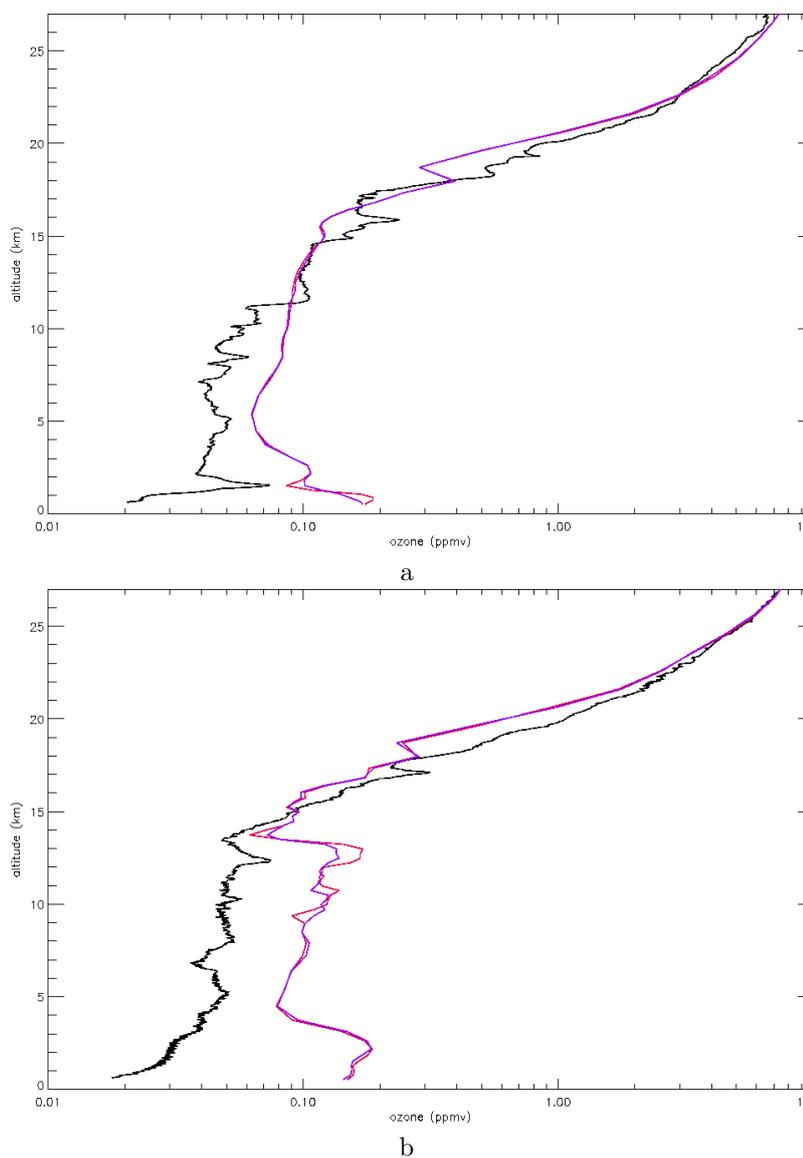


FIG. VI.3.1 – Comparaison entre les mesures des sondes ozones (en noir) et les résultats du modèle (en rouge) pour le 12 février (a) et le 13 février (b) 2004. Pour le modèle, les deux courbes affichées correspondent aux échéances du modèle encadrant l'heure de lancement des sondes. C'est le point de grille du modèle le plus proche du lieu de départ qui a été utilisé pour extraire les profils.

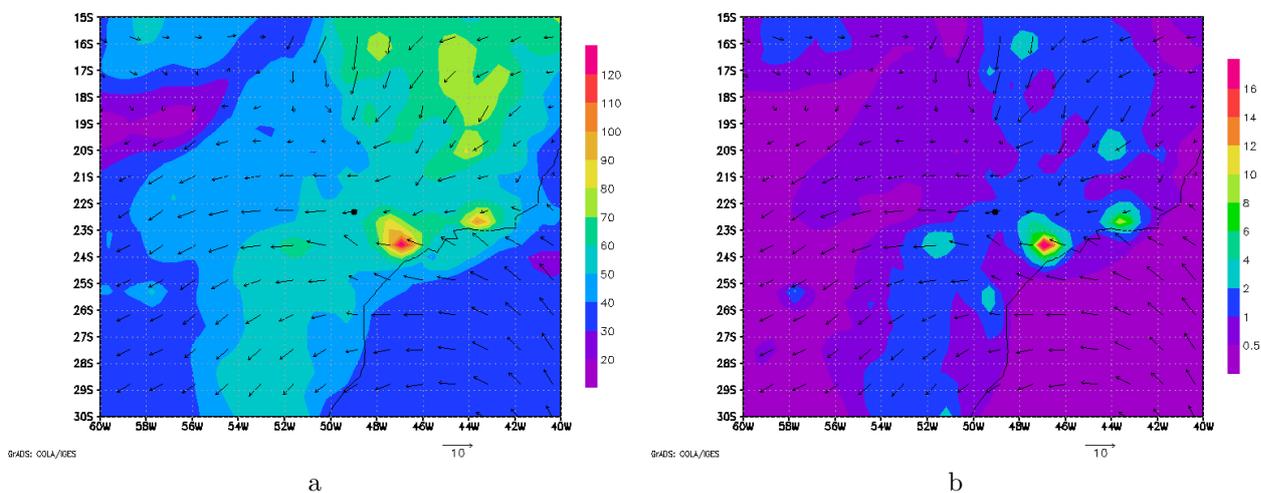


FIG. VI.3.2 – Champ horizontal de concentration en  $O_3$  (a, contours, en ppbv) et de  $NO_x$  (b, contour, en ppbv) au sol le 11 février 2004 à 14 UTC et champs de vent horizontal associés (flèches, en m/s. São Paulo se situe à environ  $-23.5^\circ N$  et  $-47^\circ E$ , et Bauru à environ  $-22.3^\circ N$  et  $-49^\circ E$  (rond noir sur la figure).

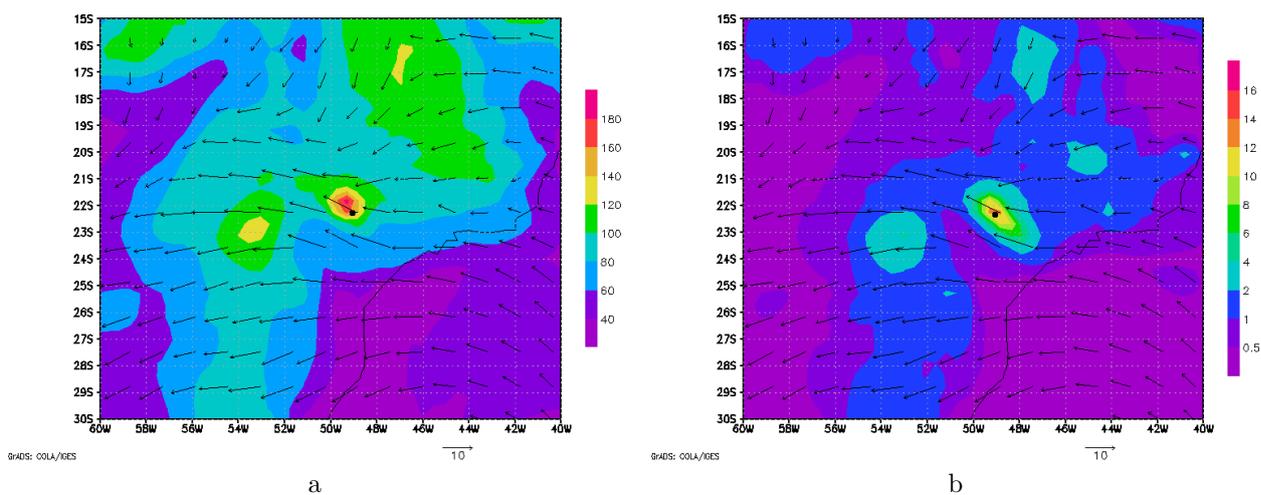


FIG. VI.3.3 – Figure similaire à la figure VI.3.2 pour le 12 février 2004 à 01 UTC.

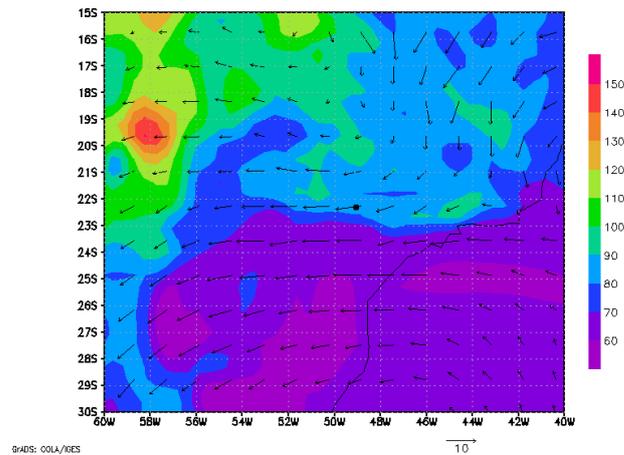


FIG. VI.3.4 – *Champ horizontal de concentration de CO (contour, en ppbv) à 2 km d'altitude le 12 février 2004 à 01 UTC et champ de vent associé (flèches, en m/s). Bauru se situe à environ  $-22.3^{\circ}N$  et  $-49^{\circ}E$  (rond noir sur la figure).*

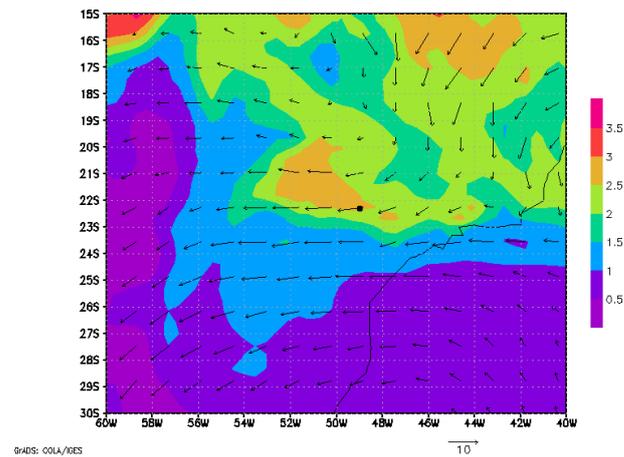


FIG. VI.3.5 – *Figure similaire à la figure VI.3.4 pour les  $NO_x$  à 2 km d'altitude le 12 février à 01 UTC.*

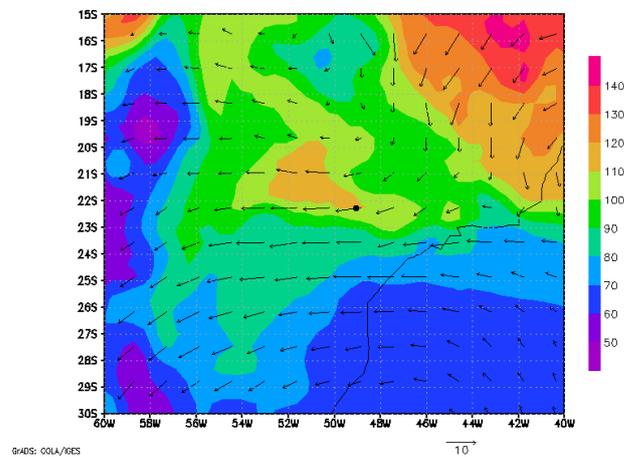


FIG. VI.3.6 – *Figure similaire à la figure VI.3.4 pour  $O_3$  à 2 km d'altitude le 12 février à 01 UTC.*

## VI.3.2 Comparaison aux mesures aéroportées

Nous disposons des mesures de  $CO$ , de  $NO$  et d'ozone acquises lors des vols du Falcon des 13 et 14 février 2004.

### VI.3.2.1 Vol du 13 février

La figure VI.3.7 montre les concentrations de  $CO$  (a), de  $NO$  (b) et d'ozone (c) mesurées lors du vol du Falcon du 13 février 2004. Pour le  $CO$ , à l'exception d'une sur-évaluation entre 68000 et 70000 s, le niveau moyen de  $CO$  est correctement suivi par le modèle. La concentration de  $NO$  est largement sur-évaluée par le modèle sur l'ensemble du vol. Il en est de même pour l'ozone. Pour ces trois espèces, les concentrations simulées le long des points échantillonnés par le Falcon ont une grande variabilité spatio-temporelle. En particulier, la variabilité des champs de  $CO$  dans la simulation présentée ici est nettement plus importante que dans la simulation avec traceurs présentée précédemment. Ceci peut s'expliquer par la diffusion appliquée aux espèces chimiques qui est plus faible que dans la simulation avec traceurs (chapitre V).

Ce vol a eu lieu sur une ligne allant du point de coordonnées géographiques (-22°N, -48°E) au point de coordonnées (-14°N, -44°E) dans une zone non convective. Sur cette ligne les rapports de mélange de  $NO$  sont plus faibles que dans les régions influencées par les zones convectives (figure VI.3.8) mais ces rapports sont tout de même supérieurs aux mesures des instruments à bord du Falcon. Il en est de même pour le rapport de mélange de l'ozone (figure VI.3.9). Ceci se concrétise par des rapports de mélange de l'ozone plus élevés dans le modèle que dans les mesures (figure VI.3.7 c). Nous avons pu mettre en évidence une cause possible de ce niveau de fond supérieur dans le modèle par rapport aux mesures. Il s'agit des contraintes aux limites sur l'ozone et sur les  $NO_x$ , provenant du modèle MOCAGE-Clim, dont les rapports de mélange très élevés dans le coin Nord-Est du domaine sont difficilement explicables (figure VI.3.10). Les vents horizontaux dans cette portion du domaine étant dirigés vers l'intérieur de ce dernier pendant toute la durée de la simulation, ceci peut conduire à remplir le domaine avec des valeurs de fond supérieures aux valeurs de fond des mesures.

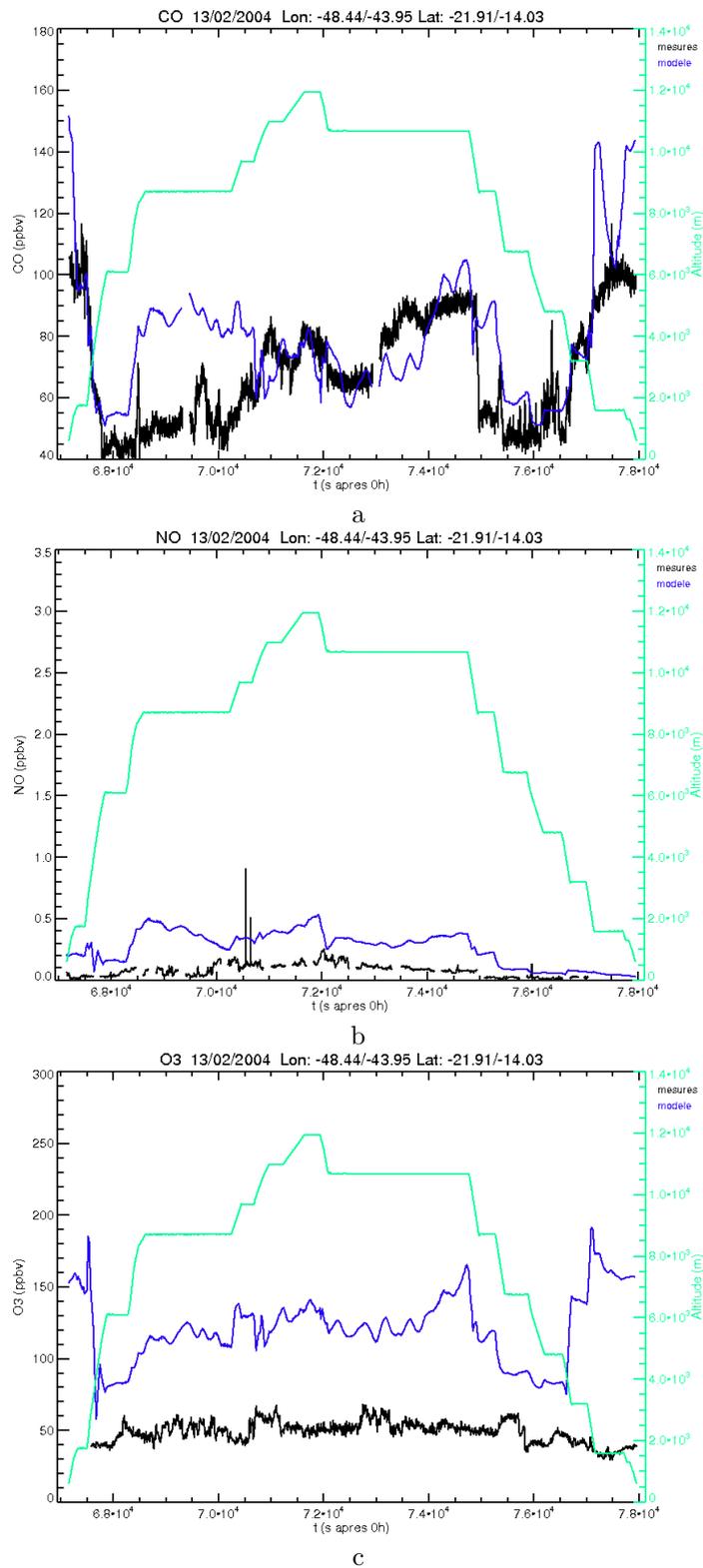


FIG. VI.3.7 – Concentrations de CO (a, ppbv), de NO (b, ppbv) et d’ozone (c, ppbv) en fonction du temps  $TU$  en s mesurées lors du vol du Falcon du 13 février 2004. La courbe verte indique l’altitude (en mètres), la courbe bleue correspond au vol simulé et la courbe noire aux mesures.

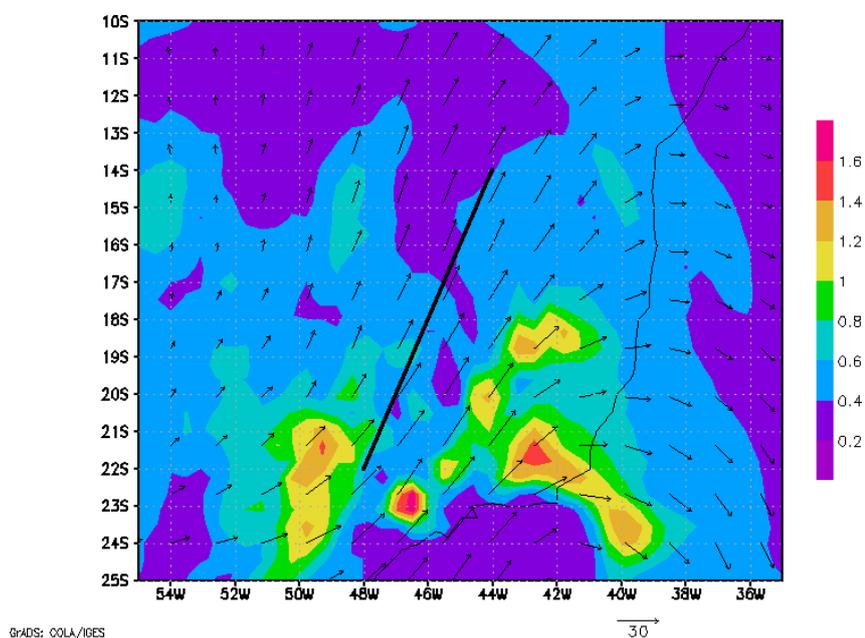


FIG. VI.3.8 – Champ horizontal de concentration de NO (contour, en ppbv) à 11 km d'altitude le 13 février 2004 à 20 UTC et champ de vent associé (flèches, en m/s). La ligne noire indique approximativement la trajectoire suivie par le Falcon lors du vol.

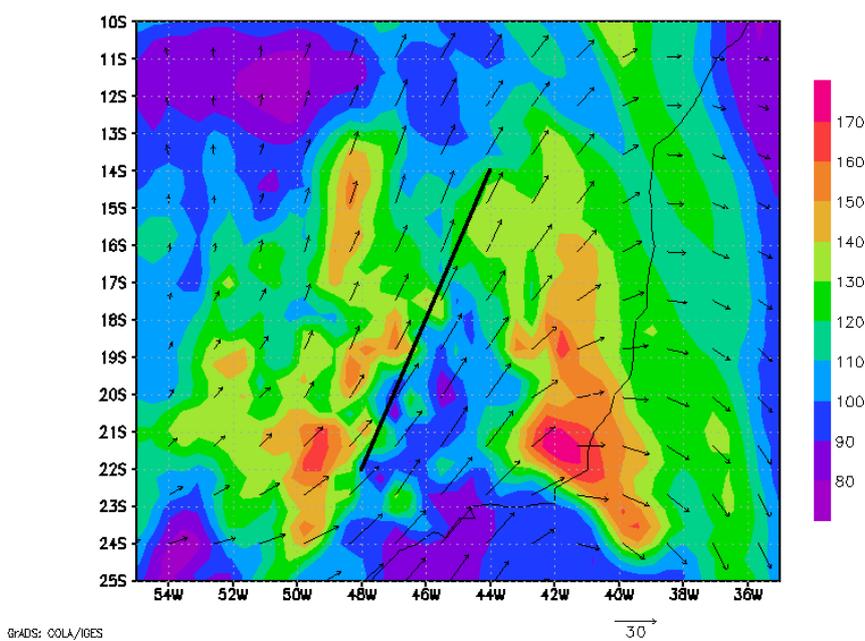


FIG. VI.3.9 – Figure similaire à la figure VI.3.8 pour l'ozone.

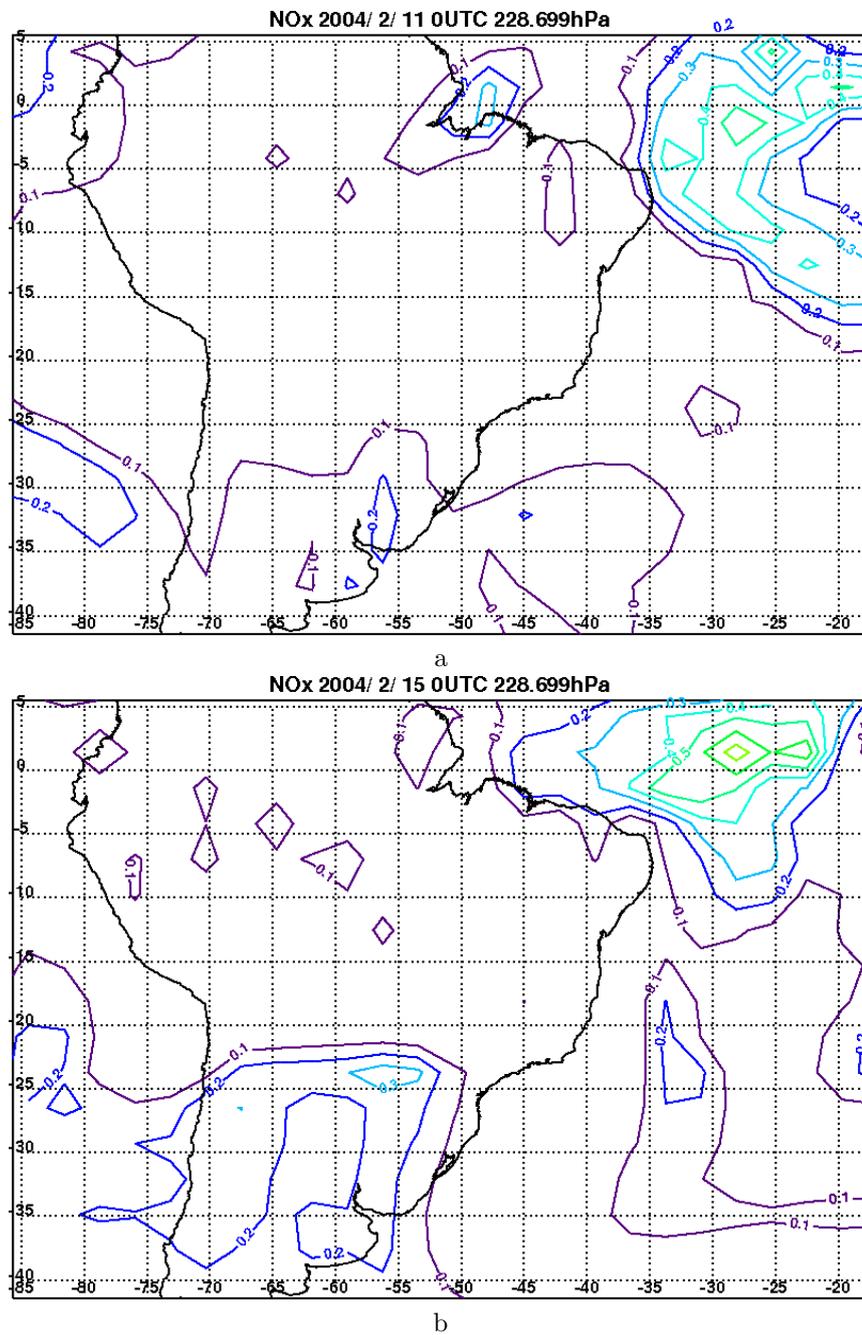


FIG. VI.3.10 – Champs horizontaux de la concentration de  $\text{NO}_x$  (ppbv) à environ 11.4 km d'altitude provenant de MOCAGE-Clim pour le 11 février à 00 UTC et pour le 15 février à 00 UTC. Le champ initial est global mais a été limité ici au domaine couvert par la grille 1.

### VI.3.2.2 Vol du 14 février

La figure VI.3.11 montre les concentrations de  $CO$  (a), de  $NO$  (b) et d'ozone (c) mesurées lors du vol du Falcon du 14 février 2004. Le niveau moyen de  $CO$  est correctement suivi par le modèle, à l'exception d'une sur-estimation entre 62000 et 68000 s et de deux sous-estimations vers 69500 s et vers 72500 s. La concentration de  $NO$  est sur-estimée par le modèle sur l'ensemble du vol, ainsi que la concentration en ozone. Comme pour le vol précédent, les champs simulés possèdent une grande variabilité spatio-temporelle.

Ce vol a eu lieu dans un domaine s'étendant en latitude entre  $-21.6^{\circ}N$  et  $-23.8^{\circ}N$  et en longitude de  $-47.5^{\circ}E$  à  $-52^{\circ}E$  aux abords d'une zone de convection. Les figures VI.3.12 et VI.3.13 montrent le rapport de mélange de  $NO$  et de l'ozone dans une grille entourant ce domaine à 11.5 km d'altitude. Les rapports de mélange de  $NO$  atteignent de fortes valeurs de l'ordre de 1 à 1.5 ppbv produites dans une zone convective centrée, en moyenne sur la journée du 14 février, sur un méridien à  $-55^{\circ}E$  entre  $-35^{\circ}N$  et  $-18^{\circ}N$  (figure VI.3.14) et transportées vers l'Est par les vents horizontaux (figure VI.3.12). Ce transport s'accompagne d'une production d'ozone (figure VI.3.13). Les fortes valeurs du rapport de mélange de  $NO$  et d'ozone qui en résultent sont sur estimées par rapport aux mesures des instruments à bord du Falcon.

Le rapport de mélange de  $NO$  est donc sur-évalué dans le modèle ce qui entraîne une forte sur-évaluation de l'ozone. Grâce à un test de sensibilité, nous avons pu vérifier que cette sur-évaluation n'est pas due à une sur-évaluation des  $NO_x$  produits par les orages mais par un transport de grandes quantités de  $NO_x$  depuis les basses couches par la convection. Ces fortes quantités de  $NO_x$  sont liées au moins partiellement aux émissions anthropiques principalement de São Paulo et de Rio de Janeiro.

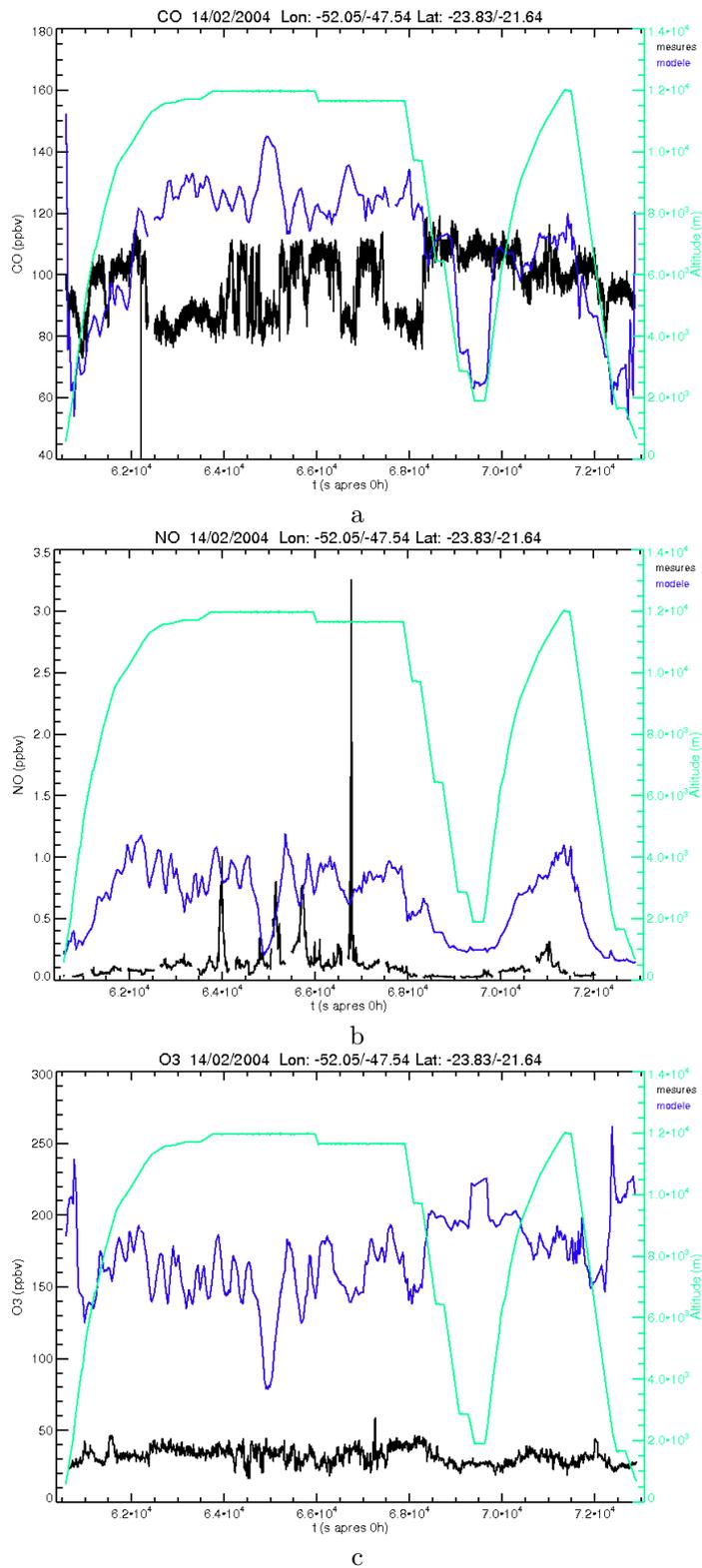


FIG. VI.3.11 – Concentrations de CO (a, ppbv), de NO (b, ppbv) et d’ozone (c, ppbv) en fonction du temps  $TU$  en s mesurées lors du vol du Falcon du 14 février 2004. La courbe verte indique l’altitude (en mètres), la courbe bleue correspond au vol simulé et la courbe noire aux mesures.

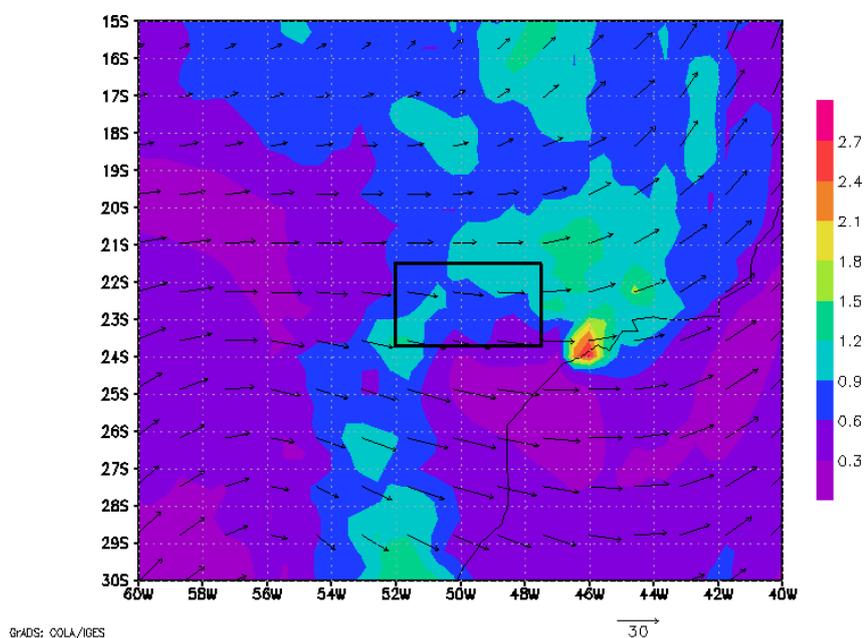


FIG. VI.3.12 – Champ horizontal de concentration de NO (contour, en ppbv) à 11.5 km d'altitude le 14 février 2004 à 18 UTC et champ de vent associé (flèches, en m/s). Le cadre noir donne les limites horizontales de la trajectoire suivie par le Falcon.

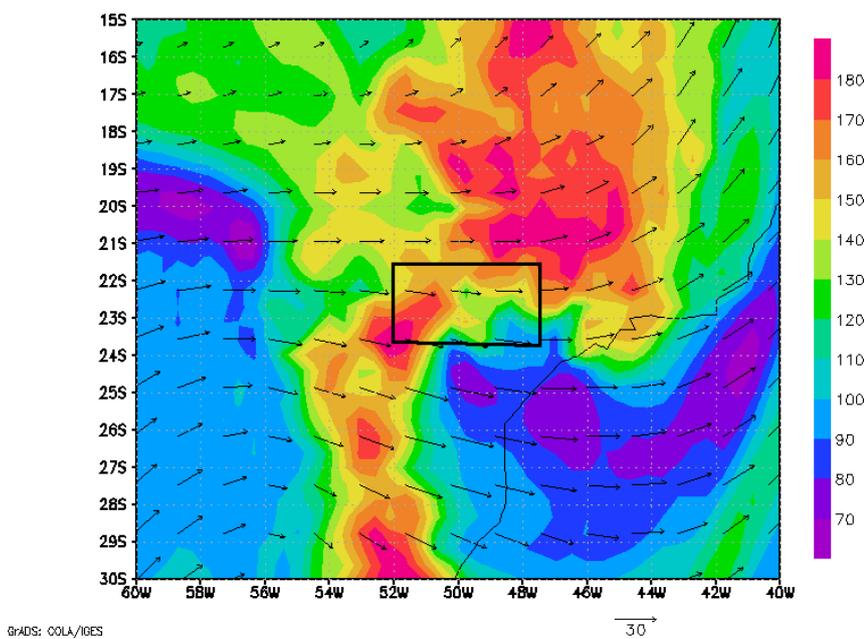


FIG. VI.3.13 – Figure similaire à la figure VI.3.12 pour l'ozone.

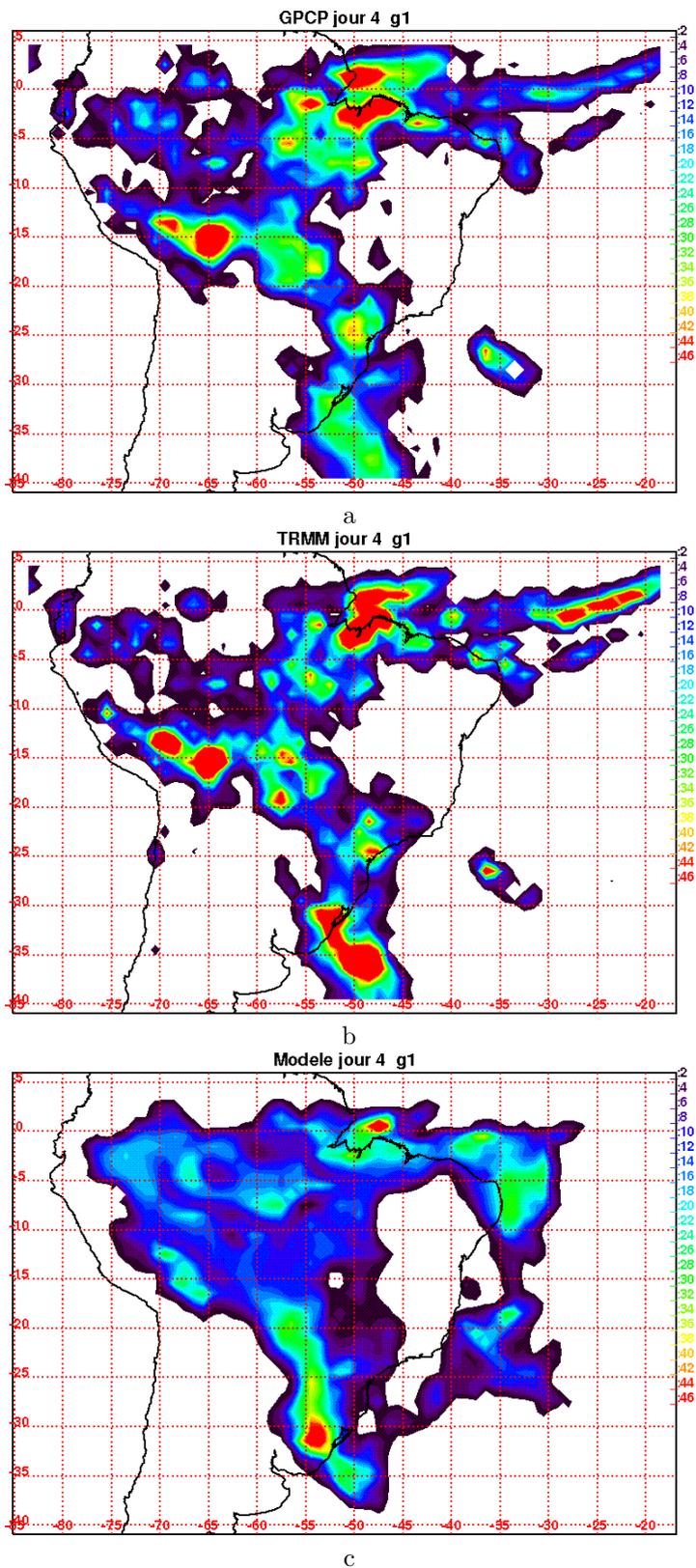


FIG. VI.3.14 – Précipitations accumulées (mm) le 14 février 2004, estimées à partir d'observations (GPCP (a) et TRMM (b)) et simulées (c) sur la grille 1.

## VI.4 Conclusion

Les résultats météorologiques sont bons sur l'ensemble de la simulation. Ceci provient principalement de l'utilisation des analyses du CEPMMT et d'une résolution fine dans la haute troposphère.

Les résultats de cette première simulation montrent que l'évolution des espèces chimiques est correctement reproduite par le modèle C-CATT-BRAMS. La comparaison des résultats aux mesures disponibles montre cependant que des améliorations sont encore à effectuer pour simuler correctement ces mesures. L'analyse de ces premiers résultats montre en effet deux problèmes importants : la fiabilité des conditions aux limites du rapport de mélange des espèces chimiques (provenant ici du modèle MOCAGE-Clim) et l'évaluation des émissions depuis le sol et en particulier celle des émissions depuis les mégacités.

Les conditions aux limites sont nécessaires pour prendre en compte les transports des espèces chimiques à grande échelle. L'importance de ces conditions aux limites sur les résultats du modèle méso-échelle dépend des situations simulées. Si les sources des espèces chimiques dans le domaine simulé sont suffisamment importantes, le transport de grande échelle peut jouer un rôle mineur. Dans la simulation présentée ici, les émissions, en particulier celles des mégacités sont importantes mais les conditions aux limites jouent aussi un rôle non négligeable au-delà de la couche limite. La comparaison aux mesures montre que ces conditions aux limites ne correspondent probablement pas à la réalité en ce qui concerne au moins une portion du domaine et peuvent entraîner une forte sur-évaluation des  $NO_x$  dans tout le domaine. Ceci montre la nécessité d'une étude approfondie de la meilleure façon de prendre en compte ces conditions aux limites dans le modèle.

Les résultats de la simulation montrent également une grande concentration des  $NO_x$  et d'ozone autour des mégacités. En cas d'activité convective ces concentrations sont transportées dans la haute troposphère en quantité probablement trop importante. Une étude est en cours au CPTEC pour tenter de mieux représenter les émissions anthropiques sur l'Amérique du Sud et leur introduction dans le modèle.

---

---

## CHAPITRE VII

---

# Conclusions et perspectives

Le transport de la pollution est à l'heure actuelle un enjeu important. En particulier, le passage des polluants de la troposphère dans la stratosphère est l'un des points clé étudié à l'heure actuelle. Ce passage troposphère-stratosphère est très dépendant de la composition de la troposphère et plus particulièrement de la haute troposphère, notamment dans la zone inter-tropicale. L'objectif des travaux menés ici était de modéliser le transport d'espèces chimiques afin de pouvoir étudier la composition de la troposphère tropicale.

A l'aide du modèle numérique 3D méso-échelle à aire limitée CATT-BRAMS, nous avons simulé le transport du monoxyde de carbone dans la troposphère du 11 février au 15 mars 2004 durant la période convective au Brésil. L'utilisation de deux grilles imbriquées de 50 km de résolution horizontale (grille 1) et de 12.5 km de résolution horizontale, avec des niveaux verticaux espacés de 900 m au maximum, a permis de conserver une configuration proche de la configuration opérationnelle utilisée au CPTEC afin de compléter les études en saison sèche menées par Freitas *et al.* (2007) et Longo *et al.* (2007). L'évolution du CATT-BRAMS vers un nouveau modèle avec chimie, le C-CATT-BRAMS, donne également aux travaux menés ici une importance un peu particulière dans la mesure où le schéma de transport utilisé est identique dans les deux modèles. Nous avons donc pu analyser le comportement du schéma de transport.

La simulation de référence menée a permis de vérifier que le comportement météorologique est globalement en bon accord avec les observations. En moyenne sur la simulation, les précipitations sont généralement cohérentes avec les observations issues des produits TRMM et GPCP. L'évolution des précipitations accumulées sur tout le domaine au cours de la simulation montrent que le modèle reproduit les variations observées, avec toutefois une tendance à légèrement sous-estimer la quantité de précipitations. Le modèle présente également une sensibilité importante à l'orographie induisant en particulier une sur-estimation des taux précipitants dans les Andes. Cela semble également induire une incertitude dans la localisation spatio-temporelle de la convection. La comparaison aux radio-sondages lancés depuis Bauru et aux mesures aéroportées du Falcon montrent que le modèle reproduit globalement bien la structure verticale de l'atmosphère, mais plus difficilement son évolution spatio-temporelle. Ceci semble provenir en partie de la convection, difficile à reproduire exactement en localisation spatialement et temporellement.

La comparaison de la répartition simulée de CO à celle mesurée par l'instrument MOPITT indique que le modèle reproduit correctement la répartition synoptique de CO en moyenne sur la simulation. Ceci vient en grande partie de l'initialisation utilisée, qui prend en compte la variabilité en altitude et en latitude de la concentration de CO mesurée par MOPITT pour la période simulée. La comparaison aux mesures aéroportées du Falcon montre que, malgré une sur-évaluation de la concentration jusqu'à 9 km et une sous-estimation au dessus, le profil moyen issu des 14 vols simulés par le modèle est globalement en bon accord avec le profil moyen issu des mesures du Falcon, en particulier dans sa forme.

Une analyse plus détaillée sur les profils verticaux moyens sur chaque vol et des vols individuels donne quelques indications sur l'origine des ces écarts :

- l'initialisation utilisée mène pour certains vols à une sur-évaluation de la concentration dans la moyenne et haute troposphère,
- les décalages de la localisation spatio-temporelle de certains phénomènes convectifs mène pour certains vols à une sous-évaluation de la concentration dans la haute troposphère,

- il semble également y avoir une sous-évaluation ou une sur-évaluation du transport convectif et/ou un biais dans les sources et/ou dans la simulation de la couche limite (et/ou dans son diagnostic) qui détermine les altitudes de déclenchement de la convection paramétrisée.

La reproduction de la répartition verticale moyenne de la concentration de CO est meilleure que celle de son évolution spatio-temporelle, comme pour les champs météorologiques.

L'étude plus détaillée de deux vols du Falcon (vol 8 et 13) indique que la localisation spatio-temporelle de la convection est de première importance pour la reproduction des structures observées lors des vols et in extenso pour le transport vertical de la pollution. Dans les deux exemples étudiés, la localisation de la convection est moins bien réalisée pour une cellule isolée ou pour un amas convectif que pour un petit groupe de cellules convectives, indiquant un rôle potentiel de l'extension spatiale horizontale du système dans sa localisation par le modèle.

L'étude de l'impact des différents transports convectifs (convection restreinte, convection profonde et effet « plume rise ») montre que :

- en saison humide, l'effet « plume rise » est en moyenne négligeable, mais peut induire de fortes différences locales,
- la convection profonde, dominante durant cette saison, et telle qu'elle est paramétrisée dans le modèle, transporte le CO majoritairement aux altitudes supérieures à 10 km,
- la convection restreinte joue principalement en moyenne troposphère. Des tests de sensibilité ont montré qu'elle se déclenche probablement trop fréquemment, au détriment de la convection profonde,
- la convection profonde et restreinte s'influence mutuellement.

Les tests de sensibilité sur les inventaires utilisés montrent qu'à l'exception des cadastres de feux de biomasse, les différences induites par les cadastres sont très faibles.

Les différents temps de vie utilisés dans les tests de sensibilité indiquent que si la concentration de OH dans la haute troposphère est plus basse que la concentration que nous avons considérée dans la simulation de référence, le modèle serait capable de reproduire la quantité de CO observée dans la haute troposphère. De même, une concentration de OH plus forte dans les basses couches mènerait dans le modèle à une concentration moins sur-évaluée. Ces deux conditions sont tout à fait plausibles compte-tenu des variations observées et simulées de la concentration de OH.

Enfin, les tests sur l'initialisation montrent que celle-ci joue un rôle à toute les échelles. Utiliser une initialisation réaliste est important à l'échelle continentale. Elle permet en effet de prendre en compte la répartition à grande échelle de CO et donc l'impact de la dynamique de grande échelle en plus de la convection. Elle améliore également les résultats de la simulation dans la haute troposphère en moyenne sur la simulation sur les points échantillonnés par le Falcon. Cependant, à l'échelle d'un vol, les différences entre les deux initialisations sont dépendantes des conditions rencontrées lors des vols. Ainsi, à une échelle locale, les simulations avec les deux types d'initialisations (issue de données et concentration nulle au départ) apportent des informations complémentaires à l'échelle locale.

Il a été montré qu'une initialisation réaliste des valeurs de fond de la concentration de CO en période convective permettait d'obtenir de meilleurs résultats. Pour encore améliorer cette initia-

lisation, ainsi que le forçage aux limites du domaine, il serait intéressant d'utiliser les champs de CO d'un modèle global. Cela est maintenant possible avec le nouveau modèle C-CATT-BRAMS, dans lequel un champ de MOCAGE peut être utilisé pour l'initialisation et en forçage aux limites, de manière similaire aux champs météorologiques.

Un autre point important dans le transport de traceurs est la résolution verticale du modèle, comme cela a été mis en évidence par Arteta *et al.* (2008b). Une résolution plus fine permet un transport de traceurs plus important dans la haute troposphère. Il serait donc intéressant de refaire la simulation de traceurs avec une résolution verticale plus fine dans la haute troposphère. Ceci pourrait également mener à une plus grande variabilité des hauteurs de convection et donc à une plus grande variabilité dans le modèle.

Enfin, la représentation de la convection dans le modèle est le point clé pour le transport des espèces chimiques. Il semble nécessaire d'effectuer des tests supplémentaires sur le diagnostic de la hauteur de la couche limite, qui conditionne fortement le déclenchement de la convection dans le modèle, ainsi que sa localisation et la quantité de traceurs transportée. La sensibilité forte de la paramétrisation de la convection à l'orographie demande également plus de tests afin d'améliorer la localisation de la convection dans le modèle. En effet, si la durée de vie du polluant est suffisamment longue, l'accumulation de ce polluant dans la basse troposphère peut compenser une erreur dans la localisation spatio-temporelle de la convection. Mais dans le cas d'une espèce de durée de vie plus courte et d'origine principalement anthropique (sources très localisées), les contraintes sur la localisation spatio-temporelle de la convection sont plus fortes si l'on veut simuler leur distribution dans la haute troposphère. Enfin, le biais moyen observé dans la haute troposphère suggère de vérifier la hauteur atteinte par la convection, par exemple à partir de données satellitaires des hauteurs de nuages, ainsi que la quantité de traceurs transportée. Il est également envisageable d'implémenter une paramétrisation de la convection moins simpliste que celle de Grell, par exemple celle d'Arakawa-Schubert modifiée par Grell (Grell *et al.*, 1994).

Les premiers résultats obtenus avec le C-CATT-BRAMS montrent que l'évolution des espèces chimiques est correctement reproduite par le modèle, avec toutefois une sur-estimation des concentrations de  $NO_x$  et d'ozone. Cela met en avant la nécessité d'évaluer correctement les émissions au sol, en particulier en ce qui concerne les mégacités. L'importance de la fiabilité de l'initialisation et des conditions aux limites est également mise en avant, notamment par la sur-estimation de la concentration de  $NO_x$  en bord de grille à partir des données de MOCAGE-Clim. Pour améliorer la simulation, des tests sont en cours au CPTEC. Dans ces tests, les sondages ozones disponibles dans le domaine simulé sur la période simulée sont utilisés pour obtenir un profil vertical moyen de la concentration en ozone. Ce profil est ensuite utilisé pour initialiser le modèle.

---

# Bibliographie

- ADLER, R. F., HUFFMAN, G. J., CHANG, A., FERRARO, R., XIE, P.-P., JANOWIAK, J., RUDOLF, B., SCHNEIDER, U., CURTIS, S., BOLVIN, D. T., GRUBER, A., SUSSKIND, J., ARKIN, P., & NELKIN, E. 2003. The Version-2 Global Precipitation Climatology Project (GPCP) Monthly Precipitation Analysis (1979-Present). *Journal of Hydrometeorology*, **4**, 1147–1167.
- ADRIAN, R. J., FERREIRA, R. T. D. S., & BOBERG, T. 1986. Turbulent thermal convection in wide horizontal fluid layers. *Experiments in Fluids*, **4**, 121–141.
- ALCALA, C. M., & DESSLER, A. E. 2002. Observations of deep convection in the tropics using the Tropical Rainfall Measuring Mission (TRMM) precipitation radar. *Journal of Geophysical Research*, **107**, 1–7.
- ALONSO, M. F., LONGO, K. M., & FREITAS, S. R. 2008. *Numerical Simulations of the Regional Climate Change Scenarios for South America, New anthropogenic emissions database upgraded with South America inventory data*. poster présenté à l'IGAC.
- ANDREAE, M., ROSENFELD, D., ARTAXO, P., COSTA, A., FRANK, G., LONGO, K.M., & SILVA DIAS, M.A.F. 2004. Smoking rain clouds over the Amazon. *Science*, **303**, 1342–1345.
- ARAKAWA, A., & SCHUBERT, W. H. 1974. Interaction of a Cumulus Cloud Ensemble with the Large-Scale Environment, Part I. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **31**, 674–701.
- ARTETA, J. 2005. *Etude de l'impact du mécanisme chimique et des taux de photolyse "online" sur les simulations 3D d'épisodes de pollution régionale. (Exercice ESCOMPTE d'intercomparaison de modèles)*. Ph.D. thesis, Université Blaise Pascal.
- ARTETA, J., CAUTENET, S., TAGHAVI, M., & AUDIFFREN, N. 2006. Impact of two chemistry mechanisms fully coupled with mesoscale model on the atmospheric pollutants distribution. *Atmos. Env.*, **40**, 7983–8001.
- ARTETA, J., MARÉCAL, V., & RIVIÈRE, E. 2008a. Regional modeling of tracer transport by tropical convection. Part I : Sensitivity to convection parameterization. *Accepté à Atmos. Chem. Phys. Discuss.*
- ARTETA, J., MARÉCAL, V., & RIVIÈRE, E. 2008b. Regional modelling of tracer transport by tropical convection. Part 2 : Sensitivity to model resolutions. *Accepté à Atmos. Chem. Phys. Discuss.*

- BAEHR, J., SCHLAGER, H., ZIEREIS, H., STOCK, P., VAN VELTHOVEN, P., BUSEN, R., STRÖM, J., & SCHUMANN, U. 2003. Aircraft observations of NO, NO<sub>y</sub>, CO and O<sub>3</sub> in the upper troposphere from 60°N to 60°S - Interhemispheric differences at midlatitudes. *Geophys. Res. Lett.*, **30**, 1–4.
- BARTH, M.C., KIM, S.-W., WANG, C., PICKERING, K.E., OTT, L.E., STENCHIKOV, G., LERICHE, M., CAUTENET, S., PINTY, J.-P., BARTHE, CH., MARI, C., HELSDON, J.H., FARLEY, R.D., FRIDLIND, A.M., & ACKERMAN, A.S. 2007. Cloud-scale model intercomparison of chemical constituent transport in deep convection. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 4709–4731.
- BERGE, E. 1993. Coupling of wet scavenging of sulphur to clouds in a numerical weather prediction model. *Tellus*, **45B**, 1–22.
- BRIAN, H., & PRATHER, M. J. 2002. Fast-J2 : accurate simulation of stratospheric photolysis in global chemical models. *J. Atmos. Chem.*, **41**, 281–296.
- CARVALHO, L. M. V., JONES, C., & LIEBMANN, B. 2004. The South Atlantic Convergence Zone : Intensity, Form, Persistence, and Relationships with Intraseasonal to Interannual Activity and Extreme Rainfall. *Journal of Climate*, **17**, 88–108.
- CASARIN, D. P., & KOUSKY, V. E. 1986. Anomalias de precipitação no sul do Brasil e variações na circulações atmosférica. *Rev. Bras. Meteor.*, **1**, 83–90.
- CAUTENET, S., FORET, G., POULET, D., AUDIFFREN, N., CAUTENET, G., ROCA, R., DESALMAND, F., LEON, J. F., & CHAZETTE, P. 2001 (March). *Mesoscale modelling of free tropospheric chemical species redistribution following deep convection during INDOEX*. Instrumental Notes 7. IPSL. ISSN 1626-8334.
- CHABOUREAU, J.-P., CAMMAS, J.-P., DURON, J., MASCART, P.J., SITNIKOV, N.M., & VOESING, H.-J. 2007. A numerical study of tropical cross-tropopause transport by convective overshoots. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 1731–1740.
- CHEN, C., & COTTON, W. R. 1983. A one-dimensional simulation of the stratocumulus-capped mixed layer. *Boundary Layer Meteorol.*, **25**, 289–321.
- CLARK, T. L. 1977. A small-scale dynamic model using a terrain-following coordinate transformation. *J. Comput. Phys.*, **24**, 186–215.
- CORTI, T., LUO, B. P., PETER, T., VÖMEL, H., & FU, Q. 2005. Mean radiative energy balance and vertical mass fluxes in the equatorial upper troposphere and lower stratosphere. *Geophys. Res. Lett.*, **32**, 1–5.
- COTTON, W.R., STEPHENS, M.A., NEHRKORN, T., & TRIPOLI, G.J. 1982. The Colorado State University three-dimensional cloud/mesoscale model - 1982. Part II : An ice phase parameterization. *J. Rech. Atmos.*, **16**, 295–320.
- COTTON, W.R., PIELKE, R.A., WALKO, R.L., LISTON, G.E., TREMBACK, C.J., JIANG, H., MCANELLY, R.L., HARRINGTON, J.Y., NICHOLLS, M.E., CARRIO, G.C., & MCFADDEN, J.P. 2003. RAMS 2001 : Current status and future directions. *Meteorol. Atmos. Phys.*, **82**, 5–29.

- CRUM, T. D., STULL, R. B., & ELORANTA, E. W. 1987. Coincident Lidar and Aircraft Observations of Entrainment into Thermals and Mixed Layers. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, **26**, 774–788.
- DAVIES, H. C. 1976. A lateral boundary formulation for multi-level prediction models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **102**, 405–418.
- DEARDORFF, J. W. 1980. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a three-dimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, **18**, 495–527.
- DEETER, M. N., EMMONS, L. K., FRANCIS, G. L., EDWARDS, D. P., GILLE, J.C., WARNER, J. X., KHATTATOV, B., ZISKIN, D., LAMARQUE, J.-F., HO, S.-P., YUDIN, V., ATTÍÉ, J.-L., PACKMAN, D., CHEN, J., MAO, D., & DRUMMOND, J. R. 2003. Operational carbon monoxide retrieval algorithm and selected results for the MOPITT instrument. *J. Geophys. Res.*, **108**, 1–11.
- DEETER, M. N., EDWARDS, D. P., GILLE, J.C., & DRUMMOND, J. R. 2007. Sensitivity of MOPITT observations to carbon monoxide in the lower troposphere. *J. Geophys. Res.*, **112**, 1–9.
- DESSLER, A. E. 2002. The effect of deep, tropical convection on the tropical tropopause layer. *Journal of Geophysical Research*, **107**, 1–5.
- DJOUAD, R., SPORTISSE, B., & AUDIFFREN, N. 2002. Numerical simulation of aqueous-phase atmospheric models : use of a non-autonomous Rosenbrock methode. *Atmos. Env.*, **36**, 873–879.
- DURRY, G., & HAUCHECORNE, A. 2005. Evidence for long-lived polar vortex air in the mid-latitude summer stratosphere from in situ laser diode CH<sub>4</sub> and H<sub>2</sub>O measurements. *Atmos. Chem. Phys.*, **5**, 1467–1472.
- DURRY, G., & MÉGIE, G. 1999. Atmospheric CH<sub>4</sub> and H<sub>2</sub>O monitoring with near-infrared InGaAs laser diodes by the SDLA, a balloonborne spectrometer for tropospheric and stratospheric in situ measurements. *Appl. Opt.*, **38**, 7342–7354.
- DURRY, G., & MÉGIE, G. 2000. In situ measurements of H<sub>2</sub>O from a stratospheric balloon by diode laser direct-differential absorption spectroscopy at 1.39  $\mu\text{m}$ . *Appl. Opt.*, **39**, 5601–5608.
- DURRY, G., AMAROUCHE, N., ZÉNINARI, V., PARVITTE, B., LE BARBU, T., & OVARLEZ, J. 2004. In situ sensing of the middle atmosphere with balloonborne near-infrared laser diodes. *Spectrochimica Acta, Part A*, **60**, 3371–3379.
- DURRY, G., HURET, N., HAUCHECORNE, A., MARÉCAL, V., POMMEREAU, J.-P., JONES, R. L., HELD, G., LARSEN, N., & RENARD, J.-B. 2006. Isentropic advection and convective uplifting of water vapour in the UT-LS as observed over Brazil (22°S) in February 2004 by in situ high resolution measurements of H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, O<sub>3</sub> and temperature. *Atmos. Chem. Phys. Disc.*, **6**, 12470–12501.
- EDEN, L., & JONES, R. 2004. *Assessment of Water Vapour Measurements Onboard Short Duration Balloons During the HIBISCUS Campaign 2003-2004*. Tech. rept. HIBISCUS 2003-2004.
- EMMONS, L., DEETER, M., EDWARDS, D., GILLE, J., ZISKIN, D., ATTÍÉ, J.-L., WARNER, J., DRUMMOND, J., YURGANOV, L., NOVELLI, P., POUGATCHEV, N., & MURCRAY, F. 2003. *Validation of MOPITT Retrievals of Carbon Monoxide*. Tech. rept. MOPITT.

- EMMONS, L. K., DEETER, M. N., GILLE, J.C., EDWARDS, D. P., ATTÍÉ, J.-L., WARNER, J., ZISKIN, D., FRANCIS, G., KHATTATOV, B., YUDIN, V., LAMARQUE, J.-F., HO, S.-P., MAO, D., CHEN, J. S., DRUMMOND, J., NOVELLI, P., SACHSE, G., COFFEY, M. T., HANNIGAN, J. W., GERBIG, C., KAWAKAMI, S., KONDO, Y., TAKEGAWA, N., SCHLAGER, H., BAEHR, J., & ZIEREIS, H. 2004. Validation of Measurements of Pollution in the Troposphere (MOPITT) CO retrievals with aircraft in situ profiles. *J. Geophys. Res.*, **109**, 1–13.
- EMMONS, L. K., PFISTER, G. G., EDWARDS, D. P., GILLE, J.C., SACHSE, G., BLAKE, D., WOFSY, S., GERBIG, C., MATROSS, D., & P., NÉDÉLEC. 2007. Measurements of Pollution in the Troposphere (MOPITT) validation exercise during summer 2004 field campaigns over North America. *J. Geophys. Res.*, **112**, 1–7.
- FAURE, C., & PAPEGAY, Y. 1998. *Odyssée user's guide. Version 1.7*. Rapport technique RT-0224. INRIA.
- FERREIRA, N. J., A., CORREIA A., & RAMIREZ, M. C. V. 2004. Synoptic scale features of the tropospheric circulation over tropical South America during th WETAMC TRMM/LBA experiment. *Atmosfera*, ., 13–30.
- FIGUEROA, S., SATYAMURTI, P., & SILVA DIAS, P. L. 1995. Simulation of the summer circulation over the South American region with an eta coordinate model. *J. Atmos. Sci.*, **52**, 1573–1584.
- FLATAU, P.J., TRIPOLI, G.J., VERLINDE, J., & COTTON, W.R. 1989. The CSU-RAMS Cloud Microphysical Module : General Theory and Code Documentation. *Atmos. Sci. Pap.*, **451**, 88 pp.
- FLOCKE, S., HERMAN, R.L., SALAWITCH, R.J., ATLAS, E., WEBSTER, C.R., SCHAUFFLER, S.M., LUEB, R.A., MAY, R.D., MOYER, E.J., ROSENLOF, K.H., SCOTT, D.C., BLAKE, D.R., & T.P., BUI. 1999. An examination of chemistry and transport processes in the tropical lower stratosphere using observations of long-lived and short-lived compounds obtained during STRAT and POLARIS. *J. Geophys. Res.*, **104**, 26625–26642.
- FOLKINS, I., OLTMANS, S.J., & THOMPSON, A.M. 2000. Tropical convective outflow and near surface equivalent potential temperatures. *Geophys. Res. Lett.*, **27**, 2549–2552.
- FORET, G. 2003. *Etude numérique multi-échelle des processus dynamiques et photochimiques contrôlant les distributions troposphériques de l'ozone et de ses précurseurs : Impact des circulations locales et de la convection profonde dans le cadre du programme INDOEX*. Ph.D. thesis, Thèse de doctorat de l'Université Blaise Pascal (Clermont-Ferrand).
- FRANK, W. M., & COHEN, C. 1987. Simulation of Tropical Convective Systems. Part I : A Cumulus Parameterization. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **44**, 3787–3799.
- FREITAS, S. R., SILVA DIAS, M. A.F., SILVA DIAS, P. L., LONGO, K. M., ARTAXO, P., ANDREAE, M. O., & FISCHER, H. 2000. A convective kinematic trajectory technique for low-resolution atmospheric models. *J. Geophys. Res.*, **105**, 24,375–24,386.
- FREITAS, S. R., LONGO, K. M., SILVA DIAS, M. A.F., SILVA DIAS, P. L., CHATFIELD, R., PRINS, E., ARTAXO, P., GRELL, G. A., & RECUERO, F. S. 2005. Monitoring the Transport of Biomass Burning Emissions in South America. *Environmental Fluid Mechanics*, **5**, 135–167.

- FREITAS, S.R., LONGO, K.M., SILVA DIAS, M.A.F., CHATFIELD, R., SILVA DIAS, P., ARTAXO, P., ANDREAE, M.O., GRELL, G.A., RODRIGUES, L.F., FAZENDA, A., & PANETTA, J. 2007. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) - Part 1 : Model description and evaluation. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **7**, 8525–8569.
- GAFFEN, D. J., SARGENT, M. A., HABERMANN, R. E., & LANZANTE, J. R. 2000. Sensitivity of Tropospheric and Stratospheric Temperature Trends to Radiosonde Data Quality. *Journal of Climate*, **13**, 1776–1796.
- GAL-CHEN, T., & SOMERVILLE, R. C. J. 1975. On the use of a coordinate transformation for the solution of the Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, **17**, 209–228.
- GANDIN, L. S. 1963. *Objective Analysis of Meteorological Fields*. GIMIZ.
- GERBIG, C., SCHMITGEN, S., KLEY, D., VOLTZ-THOMAS, A., DEWEY, K., & HAAKS, D. 1999. An improved fast-response vacuum-UV resonance fluorescence CO instrument. *J. Geophys. Res.*, **104**, 1699–1704.
- GETTELMAN, A., SALBY, M. L., & SASSI, F. 2002. Distribution and influence of convection in the tropical tropopause region. *Journal of Geophysical Research*, **107**, 1–12.
- GETTELMAN, A., FOSTER, P. M. DE F., FUJIWARA, M., FU, Q., VÖMEL, H., GOHAR, L. K., JOHANSON, C., & AMMERMAN, M. 2004. Radiation balance of the tropical tropopause layer. *Journal of Geophysical Research*, **109**, 1–12.
- GEVAERD, R., & FREITAS, S.R. 2006. Estimava operacional da umidade do solo para iniciação de modelos de previsão numérica da atmosfera. Parte I : descrição da metodologia e validação. *Revista Brasileira de Meteorologia*, **21**, 1–15.
- GRELL, G.A. 1993. The pronostic Evaluation of Assumptions Used by Cumulus Parameterizations. *Mon. Wea. Rev.*, **121**, 764–787.
- GRELL, G.A., & DÉVÉNYI, D. 2002. A generalized approach to parameterizing convection combining ensemble and data assimilation techniques. *Geophys. Res. Lett.*, **29**(14), 1693.
- GRELL, G.A., DUDHIA, J., & STAUFFER, D. R. 1994. *A Description of the Fifth-Generation Penn State/NCAR Mesoscale Model (MM5)*. Tech. rept. NCAR.
- GROSVENOR, D.P., CHOULARTON, T.W., COE, H., & HELD, G. 2007. A study of the effects of overshooting deep convection on the water content of the TTL and lower stratosphere from Cloud Resolving Model simulations. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 4977–5002.
- HAIRER, E., & WANNER, G. 1991. *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer.
- HARRINGTON, J. Y. 1997. *The effects of radiative and microphysical processes on simulated warm and transition season Arctic stratus*. Ph.D. thesis, Colorado State University, Department of Atmospheric Science, Fort Collins, CO80523.
- HAYNES, P., & SHUCKBURGH, E. 2000. Effective diffusivity as a diagnostic of atmospheric transport 1. Stratosphere. *J. Geophys. Res.*, **105**, 22777–22794.

- HIGHWOOD, E.J., & HOSKINS, B.J. 1998. The tropical tropopause. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, **124**, 1579–1604.
- HILL, G. E. 1974. Factors controlling the size and spacing of cumulus clouds as revealed by numerical experiments. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **31**, 646–673.
- HÖLLER, H., FINKE, U., HUNTRIESER, H., HAGEN, M., & FEIGL, C. 1999. Lightning produced NO<sub>x</sub> (LINOX) - Experimental design and case study results. *J. Geophys. Res.*, **104**, 13911–13922.
- HUFFMAN, G. J., ADLER, R.F., MORISSEY, M. M., BOLVIN, D. T., CURTIS, S., JOYCE, R., MCGAVOCK, B., & SUSSKIND, J. 2001. Global Precipitation at One-Degree Daily Resolution from Multisatellite Observations. *Journal of Hydrometeorology*, **2**, 36–50.
- HUFFMAN, G. J. AND R. F. ADLER, BOLVIN, D. T., GU, G., NELKIN, E. J., BOWMAN, K. P., HONG, Y., STOCKER, E. F., & WOLFF, D. B. 2007. The TRMM multi-satellite precipitation analysis : quasi-global, multi-year, combined-sensor precipitation estimates at fine scale. *J. Hydrometeor.*, **8**, 38–55.
- HUNTRIESER, H., SCHLAGER, H., FEIGL, C., & HÖLLER, H. 1998. Transport and production of NO<sub>x</sub> in electrified thunderstorms : Survey of previous studies and new observation at midlatitudes. *J. Geophys. Res.*, **103**, 28247–28264.
- HUNTRIESER, H., FEIGL, C., SCHLAGER, H., SCHRÖDER, F., GERBIG, C., VAN VELTHOVEN, P., FLATØY, F., THÉRY, C., PETZOLD, A., HÖLLER, H., & SCHUMANN, U. 2002. Airborne measurements of NO<sub>x</sub>, tracer species and small particles during the European Lightning Nitrogen Oxides Experiment. *J. Geophys. Res.*, **107**, 1–24.
- HUNTRIESER, H., HELAND, J., & SCHLAGER, H. ET AL. 2005. Intercontinental air pollution transport from North America to Europe : Experimental evidence from airborne measurements and surface observations. *J. Geophys. Res.*, **110**, 1–22.
- HUNTRIESER, H., SCHLAGER, H., ROIGER, A., LICHTENSTERN, M., SCHUMANN, U., KURZ, C., BRUNNER, D., SCHWIERZ, C., RICHTER, A., & STOHL, A. 2007. Lightning-produced NO<sub>x</sub> over Brazil during TROCCINOX : airborne measurements in tropical and subtropical thunderstorms and the importance of mesoscale convective systems. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 2987–3013.
- HUNTRIESER, H., SCHUMANN, U., SCHLAGER, H., HÖLLER, H., GIEZ, A., BETZ, H.-D., BRUNNER, D., FORSTER, C., JR., O. PINTO, & CALHEIROS, R. 2008. Lightning activity in Brazilian thunderstorms during TROCCINOX : implications for NO<sub>x</sub> production. *Atmos. Chem. Phys.*, **8**, 921–953.
- JAPAR, S. M., & NIKI, H. 1975. Gas-phase reactions of the nitrate radical with olefins. *J. Phys. Chem.*, **79**, 1629–1632.
- JONKER, H. J. J., HEUS, T., & SULLIVAN, P. P. 2008. A refined view of vertical mass transport by cumulus convection. *Geophys. Res. Lett.*, **35**, 1–5.
- KAIN, J.S., & FRITSCH, J. M. 1990. A One-Dimensional Entraining / Detraining Plume Model and Its Application to Convective Parameterization. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **47**, 2784–2802.

- KENT, E. C., TAYLOR, P. K., TRUSCOTT, B. S., & HOPKINS, J. A. 1993. The accuracy of voluntary observing ship's meteorological observations. *Journal of the Atmospheric Oceanic Technology*, **10**, 591–608.
- KENT, E. C., CHALLENGOR, P. G., & TAYLOR, P. K. 1999. A statistical determination of the random observational errors present in voluntary observing ship's meteorological reports. *Journal of the Atmospheric Oceanic Technology*, **16**, 905–914.
- KHAIROUTDINOV, M., & RANDALL, D. 2006. High-Resolution Simulation of Shallow-to-Deep Convection Transition over Land. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **63**, 3421–3436.
- KILADIS, G. N., & WEICKMANN, K. M. 1992. Circulation anomalies associated with tropical convection during northern winter. *Mon. Wea. Rev.*, **120**, 1900–1923.
- KLEMP, J. B., & LILLY, D. K. 1978. Numerical simulation of hydrostatic mountain waves. *J. Atmos. Science*, **35**, 78–107.
- KLEMP, J.B., & DURRAN, D.R. 1983. An upper boundary condition permitting internal gravity wave radiation in numerical mesoscale models. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 430–444.
- KLEMP, J.B., & WILHELMSON, R. B. 1978a. Simulation of right- and left-moving storms produced through storm splitting. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1097–1110.
- KLEMP, J.B., & WILHELMSON, R.B. 1978b. The simulation of three-dimensional convective storm dynamics. *J. Atmos. Sci.*, **35**, 1070–1096.
- KODAMA, Y.-M. 1992. Large-scale common features of subtropical precipitation zones (the Baiu frontal zone, the SPCZ, and the SACZ). Part I : Characteristics of subtropical frontal zones. *J. Meteor. Soc. Japan*, **70**, 813–835.
- KOMHYR, W. D., BARNES, R. A., BROTHERS, G. B., LATHROP, J. A., & OPPERMAN, D. P. 1995. Electrochemical concentration cell ozonesonde performance evaluation during STOIC 1989. *J. Geophys. Res.*, **100**, 9131–9244.
- KOUSKY, V. E., & CASARIN, D. P. 1986. Rainfall anomalies in southern Brazil and related atmospheric circulation features. *Page 435–438 of : Extended Abstract, Second Int. Conf. on Southern Hemisphere Meteorology*. Amer. Meteor. Soc., Wellington, New Zealand.
- KOUSKY, V. E., & KAYANO, M. T. 1994. Principal modes of outgoing longwave radiation and 250-mb circulation for the South American sector. *J. Climate*, **7**, 1131–1143.
- KRISHNAMURTI, T. N., LOW-NAM, S., & PASCH, R. 1983. Cumulus Parameterization and Rainfall Rates II. *Mon. Wea. Rev.*, **111**, 815–828.
- KUO, H.L. 1974. Further studies of the parameterization of the influence of cumulus convection on large-scale flow. *J. Atmos. Sci.*, **31**, 118–133.
- LAWRENCE, M.G., JÖCKEL, P., & VON KUHLMANN, R. 2001. What does the global mean OH concentration tell us? *Atmos. Chem. Phys.*, **1**, 37–49.
- LEITERER, H., DIER, H., NAGEL, D., & NAEBERT, T. 2000. *Method for Correction of RS80 A-Humicap Humidity Profiles*. Tech. rept. German Weather Service, Meteorological Observatory Lindenberg.

- LENTERS, J. D., & COOK, K. H. 1999. Summertime precipitation variability over South America : Role of the large-scale circulation. *Mon. Wea. Rev.*, **127**, 409–431.
- LIEBMANN, B., KILADIS, G. N., MARENGO, J. A., AMBRIZZI, T., & GLICK, J. D. 1999. Sub-monthly convective variability over South America and the South Atlantic convergence zone. *J. Climate*, **12**, 1877–1891.
- LIEBMANN, B., JONES, C., & CARVALHO, L. M. V. 2001. Interannual Variability of Daily Extreme Precipitation Events in the State of Sa~o Paulo, Brazil. *Journal of Climate*, **14**, 208–218.
- LILLY, D. K. 1962. On the numerical simulation fo buoyant convection. *Tellus*, **XIV**, 148–172.
- LIU, C., & ZIPSER, E. J. 2005. Global distribution of convection penetrating the tropical tropopause. *J. Geophys. Res.*, **110**, 1–12.
- LONGO, K.M., FREITAS, S.R., SETZER, A., PRINS, E., ARTAXO, P., & ANDREAE, M. O. 2007. The Coupled Aerosol and Tracer Transport model to the Brazilian developments on the Regional Atmospheric Modeling System (CATT-BRAMS) - Part 2 : Model sensitivity to the biomass burning inventories. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, **7**, 8571–8595.
- LOUIS, J.F. 1979. A parametric model of vertical eddy fluxes in atmosphere. *Boundary Layer Meteorol.*, **17**, 187–202.
- MADDEN, R., & JULIAN, P. 1994. Observations of the 40–50-day tropical oscillation—A review. *Mon. Wea. Rev.*, **122**, 814–837.
- MADRONICH, S. 1992. Implications of recent total atmospheric ozone measurements for biologically active ultraviolet radiation reaching the Earth’s surface. *Geophys. Res. Lett.*, **19**, 37–40.
- MAHRER, Y., & PIELKE, R.A. 1977. A numerical study of the airflow over irregular terrain. *Beitrage zur Physik der Atmosphere*, **50**, 98–113.
- MARÉCAL, V., RIVIÈRE, E., HELD, G., CAUTENET, S., & FREITAS, S. R. 2006. Modelling study of the impact of deep convection on the UTLS air composition. Part I : analysis of ozone precursors. *Atmos. Chem. Phys.*, **6**, 1567–1584.
- MARÉCAL, V., DURRY, G., LONGO, K., FREITAS, S., RIVIÈRE, E. D., & PIRRE, M. 2007. Mesoscale modelling of water vapour in the tropical UTLS : two case studies from the HIBISCUS campaign. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 1471–1489.
- MARI, C., JACOB, J., & BECHTOLD, P. 2000. Transport and scavenging of soluble gases in a deep convective cloud. *J. Geophys. Res.*, **105**, 22255–22268.
- MCCUMBER, M.C., & PIELKE, R.A. 1981. Simulation of the effects of surface fluxes of heat and moisture in a mesoscale numerical model. Part 1 : soil layer. *J. Geophys. Res.*, **86**, 9929–9938.
- MCPHADEN, M. J., & COAUTHORS. 1998. The tropical ocean global atmosphere (TOGA) observing system : A decade of progress. *J. Geophys. Res.*, **103**, 14169–14240.
- MEEHL, G. A. 1992. Effect of tropical topography on global climate. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, **20**, 85–112.

- MELLOR, G. L., & YAMADA, T. 1974. A hierarchy of turbulence closure models for planetary boundary layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **31**, 1791–1806.
- MELLOR, G. L., & YAMADA, T. 1982. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Rev. Geophys. Space Phys.*, **20**, 851–875.
- MESINGER, F., & ARAKAWA, A. 1976. Numerical methods used in atmospheric models. *GARP Publication Series*, **14**, 64.
- MIDDLETON, P., STOCKWELL, W. R., & CARTER, W. P. L. 1990. Aggregation and analysis of volatile organic compound emissions for regional modeling. *Atmos. Env.*, **24A**, 1107–1133.
- MILOSHEVICH, L. M., VÖMEL, H., PAUKKUNEN, A., HEYMSFIELD, A., & OLTMANS, S. J. 2001. Characterization and Correction of Relative Humidity Measurements from Vaisala RS80-A Radiosondes at Cold Temperatures. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **18**, 135–156.
- MILOSHEVICH, L. M., VÖMEL, H., OLTMANS, S. J., & PAUKKUNEN, A. 2003. In Situ Validation of a Correction for Time-Lag and Bias Errors in Vaisala RS80-H Radiosonde Humidity Measurements. *In : Thirteen ARM Science Team Meeting Proceedings*.
- MORRIS, E. D. JR, & NIKI, H. 1974. Reaction of the nitrate radical with acetaldehyde and propylene. *J. Phys. Chem.*, **78**, 1337–1338.
- NOGUÉS-PAEGLE, J., & MO, K. C. 1997. Alternating Wet and Dry Conditions over South America during Summer. *Monthly Weather Review*, **125**, 279–291.
- NOWICKI, S. M. J., & MERCHANT, C. J. 2004. Observations of diurnal and spatial variability of radiative forcing by equatorial deep convective clouds. *Journal of Geophysical Research*, **109**, 1–6.
- PAEGLE, J. N., BYERLE, L. A., & MO, K. C. 2000. Intraseasonal modulation of South American summer precipitation. *Mon. Wea. Rev.*, **128**, 837–850.
- PAN, L., GILLE, J.C., EDWARDS, D. P., BAILEY, P. L., & RODGERS, C. D. 1998. Retrieval of tropospheric carbon monoxide for the MOPITT experiment. *J. Geophys. Res.*, **103**, 32277–32290.
- PARK, C.-K., & SCHUBERT, S. D. 1993. Remotely forced intraseasonal oscillations over the tropical Atlantic. *J. Atmos. Sci.*, **50**, 89–103.
- PARVITTE, B., ZÉNINARI, V., POUCHET, I., & DURRY, G. 2002. Diode laser spectroscopy of H<sub>2</sub>O in the 7165–7185 cm<sup>-1</sup> range for atmospheric applications. *J. Quant. Spectros. Radiat. Trans.*, **75**, 493–507.
- PICKERING, K. E., WANG, Y., TAO, W.-K., PRICE, C., & MÜLLER, J.-F. 1998. Vertical distributions of lightning NO<sub>x</sub> for use in regional and global chemical transport models. *J. Geophys. Res.*, **103**, 31203–31216.
- PIELKE, R.A. 1974. A three-dimensional numerical model of sea breeze over South Florida. *Mon. Wea. Rev.*, **fev**, 115–139.

- PIELKE, R.A., WALKO, R.L., EASTMAN, J.L., LYONS, W.A., STOCKER, R.A., ULIASZ, M., & TREMBACK, C. J. 1992. Recent achievements in the meteorological modelling of local weather and air quality. *Trends in Atmospheric Science*, **1**, 287–307.
- PLATT, U., PERNER, D., WINER, A. M., HARRIS, G. W., & PITTS, J. N. JR. 1980. Detection of NO<sub>3</sub> in the polluted troposphere by differential optical absorption. *Geophys. Res. Lett.*, **7**, 89–92.
- POMMERAU, J.-P., GARNIER, A., HELD, G., GOMES, A.-M., GOUTAIL, F., DURRY, G., BORCHI, F., HAUCHECORNE, A., MONTOUX, N., COCQUEREZ, P., LETRENNE, G., VIAL, F., HERTZOG, A., LEGRAS, B., PISSO, I., PYLE, J. A., HARRIS, N. R. P., JONES, R. L., ROBINSON, A., HANSFORD, G., EDEN, L., GARDINER, T., SWANN, N., KNUDSEN, B., LARSEN, N., NIELSEN, J., CHRISTENSEN, T., CAIRO, F., PIRRE, M., MARÉCAL, V., HURET, N., RIVIÈRE, E., COE, H., GROSVENOR, D., EDVARSEN, K., DONFRANCESCO, G. DI, RICAUD, P., BERTHELIER, J.-J., GODEFROY, M., SERANI, E., LONGO, K., & FREITAS, S. 2007. An overview of the HIBISCUS campaign. *Atmos. Chem. Phys. Discussions*, **7**, 2389–2475.
- PRICE, C., & RIND, D. 1992. A simple lightning parameterization for calculating global lightnings distributions. *J. Geophys. Res.*, **97**, 9919–9933.
- PRICE, C., PENNER, J., & PRATHER, M. J. 1997. from lightning. 1. Global distribution based on lightning physics. *J. Geophys. Res.*, **102**, 5929–5941.
- PRINN, R.G., HUANG, J., WEISS, R.F., CUNNOLD, D.M., FRASER, P.J., SIMMONDS, P.G., MCCULLOCH, A., HARTH, C., SALAMEH, P., O'DOHERTY, S., WANG, R.J.J., PORTER, L., & MILLER, B.R. 2001. Evidence for substantial variations of atmospheric hydroxyl radicals in the past two decades. *Science*, **292**, 1882–1888.
- PRINS, E., FELTZ, J., MENZEL, W., & WARD, D. 1998. An overview of GOES-8 diurnal fire and smoke results for SCAR-B and 1995 fire season in South America. *J. Geophys. Res.*, **103**, 31821–31835.
- RAO, G. V., & ERGODAN, S. 1989. The atmospheric heat source over the Bolivian Plateau for a mean January. *Bound.-Layer Meteor.*, **46**, 13–33.
- REYNOLDS, R. W., & SMITH, T. M. 1994. Improved global sea surface temperature analyses using optimum interpolation. *Journal of Climate*, **7**, 929–948.
- REYNOLDS, R. W., RAYNER, N. A., SMITH, T. M., STOCKES, D. C., & WANG, W. 2002. An improved In Situ and Satellite SST Analysis for Climate. *Journal of Climate*, **15**, 1609–1625.
- RICAUD, P., BARRET, B., ATTÍÉ, J.-L., MOTTE, E., LE FLOCHMOËN, E., TEYSSÈDRE, H., PEUCH, V.-H., LIVESEY, N.J., LAMBERT, A., & POMMERAU, J.P. 2007. Impact of land convection on troposphere-stratosphere exchange in the tropics. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 5639–5657.
- RIVIÈRE, E., MARÉCAL, V., CAUTENET, S., & LARSEN, N. 2006. Modelling study of the impact of deep convection on the UTLS air composition. Part II : ozone budget in the TTL. *Atmos. Chem. Phys.*, **6**, 1585–1598.

- ROELOFS, G.J., & LELIEVELD, J. 2000. Tropospheric ozone simulation with a chemistry-general circulation model : Influence of higher hydrocarbon chemistry. *J. Geophys. Res.*, **105**, 22 697–22 712.
- ROSENBROCK, H. H. 1963. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Comput. J.*, **5**, 329–330.
- ROSSOW, W. B., & PEARL, C. 2007. 22-Year survey of tropical convection penetrating into the lower stratosphere. *Geophys. Res. Lett.*, **34**, 1–4.
- SALBY, M. L., HENDON, H. H., WOODBERRY, K., & TANAKA, K. 1991. Analysis of global cloud imagery from multiple satellites. *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, **72**, 467–480.
- SALIO, P., NICOLINI, M., & ZIPSER, E. J. 2007. Mesoscale convective systems over southeastern South America and their relationship with the South American low-level jet. *Mon. Wea. Rev.*, **135**, 1290–1309.
- SALZMANN, M., LAWRENCE, M.G., PHILLIPS, V.T.J., & DONNER, L.J. 2007. Model sensitivity studies regarding the role of the retention coefficient for the scavenging and redistribution of highly soluble trace gases by deep convective cloud systems. *Atmos. Chem. Phys.*, **7**, 2027–2045.
- SALZMANN, M., LAWRENCE, M.G., PHILLIPS, V.T.J., & DONNER, L.J. 2008. Cloud system resolving model study of the roles of deep convection for photo-chemistry in the TOGA COARE/CEPEX region. *Atmos. Chem. Phys.*, **8**, 2741–2757.
- SANDER, S.P., FRIEDL, R.R., RAVISHANKARA, A.R., GOLDEN, D.M., KOLB, C.E., KURYLO, M.J., MOLINA, M.J., MOORTGAT, G.K., KELLER-RUDECK, H., FINLAYSON-PITTS, B.J., WINE, P.H., HUIE, R.E., & ORKIN, V.L. 2006. *Chemical kinetics and photochemical data for use in atmospheric studies*. JPL publication.
- SANDU, A., VERWER, J. G., BLOM, J. G., & SPEE, E. J. 1997. Benchmarking Stiff Ode Solvers For Atmospheric Chemistry Problems II : Rosenbrock Solvers. *Atmospheric Environment*, **31**, 3459–3472.
- SCHUMANN, U., KONOPKA, P., BAUMANN, R., BUSEN, R., GERZ, T., SCHLAGER, H., SCHULTE, P., & VOLKERT, H. 1995. Estimate of diffusion parameters of aircraft exhaust plumes near the tropopause from nitric oxide and turbulence measurements. *J. Geophys. Res.*, **100**, 14147–14162.
- SEINFELD, J. H., & PANDIS, S. N. 1998. *Atmospheric chemistry and physics*. New York.
- SHERWOOD, S., HORINOCHI, T., & ZELEZNIK, H. A. 2003. Convective Impact on Temperatures Observed near the Tropical Tropopause. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **60**, 1847–1856.
- SHERWOOD, S. C., & DESSLER, A. E. 2001. A Model for Transport across the Tropical Tropopause. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **58**, 765–779.
- SMAGORINSKY, J. 1963. General circulation experiments with the primitive equations : I : The basic experiments. *Monthly Weather Review*, **91**, 99–164.
- SOMMERFELD, A. 1964. *Partial differential equations in physics*. Vol. 6. Academic Press.

- SORBJAN, Z. 1996. Effects Caused by Varying the Strength of the Capping Inversion Based on a Large Eddy Simulation Model of the Shear-Free Convective Boundary Layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **53**, 2015–2024.
- SPIVAKOVSKY, C.M., LOGAN, J.A., MONTZKA, S.A., BALKANSKI, Y.J., FOREMAN-FOWLER, M., JONES, D.B.A., HOROWITZ, L.W., FUSCO, A.C., BRENNINKMEIJER, C.A.M., PRATHER, M.J., WOFSY, S.C., & MCELROY, M.B. 2000. Three-dimensional climatological distribution of tropospheric OH : Update and evaluation. *J. Geophys. Res.*, **105**, 8931–8980.
- STEPHENSON, D.B., & DOBLAS-REYES, F.J. 2000. Statistical methods for interpreting Monte Carlo ensemble forecasts. *Tellus*, **52A**, 300–322.
- STOCKWELL, W.R., MIDDLETON, P., CHANG, J.S., & TANG, X. 1990. The second generation Regional Acid Deposition Model chemical mechanism for regional air quality modeling. *J. Geophys. Res.*, **95**, 16343–16367.
- STOCKWELL, W.R., KIRCHNER, F., KUHN, M., & SEEFELD, S. 1997. A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling. *J. Geophys. Res.*, **102**, 25847–25879.
- STULL, R. B. 1985. A Fair-Weather Cumulus Cloud Classification Scheme for Mixed-Layer Studies. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, **24**, 49–56.
- SULLIVAN, P. P., MOENG, C.-H., STEVENS, B., LENSCHOW, D. H., & MAYOR, S. D. 1998. Structure of the Entrainment Zone Capping the Convective Atmospheric Boundary Layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, **55**, 3042–3064.
- TIE, X., MADRONICH, S., WALTERS, S., ZHANG, R., RASCH, P., & COLLINS, W. 2003. Effects of clouds on photolysis and oxydants in the troposphere. *Journal of Geophysical Research*, **108**, 1–25.
- TOON, O.B., TURCO, R.P., WESTPHAL, D., MALONE, R., & LIU, M.S. 1988. A multidimensional model for aerosols : Description of the computational analogs. *J. Atmos. Sci.*, **45**, 2123–2143.
- TOON, O.B., MCKAY, C.P., ACKERMAN, T.P., & SANTHANAM, K. 1989. Rapid calculation of radiative heating rates and photodissociation rates in inhomogeneous multiple scattering atmosphere. *J. Geophys. Res.*, **94**, 16287–16301.
- TREMBACK, C.J. 1990. *Numerical simulation of a mesoscale convective complex : model development and numerical results*. Ph.D. thesis, Colorado State University, Dept. of Atmospheric Science, Fort Collins, CO 80523.
- TREMBACK, C.J., & KESSLER, R. 1985. A surface temperature and moisture parameterization for use in mesoscale numerical models. *In : 7th conference on Numerical Weather Prediction*.
- TRIPOLI, G.J., & COTTON, W.R. 1982. The Colorado State University Three-Dimensional Cloud/Mesoscale Model. Part I : General Theoretical Framework and Sensitivity Experiments. *J. Rech. Atmos.*, **16**, 185–195.
- TURNER, D. D., LESHT, B. M., CLOUGH, S. A., LILJEGREN, J. C., REVERCOMB, H. E., & TOBIN, D. C. 2003. Dry bias and Variability in Vaisala RS80-H Radiosonde : The ARM Experiment. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **20**, 117–132.

- VERLINDE, J., FLATAU, P.J., & COTTON, W.R. 1990. Analytical solutions to the collection growth equation : Comparison with approximate methods and application to cloud microphysics parameterization schemes. *J. Atmos. Sci.*, **47**, 2871–2880.
- VERWER, J. H., SPEE, E. J., BLOM, J. G., & HUNSDORFER., W. H. 1999. A second order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problem. *SIAM J. Sc. Comput.*, **20**, 1456–1480.
- WALKO, R.L., COTTON, W.R., MEYERS, M.P., & J.Y., HARRINGTON. 1995. New RAMS cloud microphysics parameterization Part I : the single-moment scheme. *Atmos. Res.*, **38**, 29–62.
- WANG, J., COLE, H. L., CARLSON, D. J., MILLER, E. R., BEIERLE, K., PAUKKUNEN, A., & LAINE, T. K. 2002. Corrections of Humidity Measurements Errors from the Vaisala RS80 Radiosonde - Application to TOGA COARE Data. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, **19**, 981–1002.
- WANG, K.Y., PYLE, J.A., SHALLCROSS, D.E., & LARRY, D.J. 2001. Formulation and evaluation of IMS, an interactive three-dimensional tropospheric chemical transport model 2. model chemistry and comparison of modelled CH<sub>4</sub>, CO, and O<sub>3</sub> with surface measurements. *J. Atmos. Chem.*, **38**, 31–71.
- WANG, M., & PAEGLE, J. 1996. Impact of analysis uncertainty upon regional atmospheric moisture flux. *J. Geophys. Res.*, **101**, 7291–7303.
- WARNECK, P. 1988. *Chemistry of the Natural Atmosphere*. International Geophysics Series.
- WESELY, M.L. 1989. Parametrization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmos. Environ.*, **23**, 1293–1304.
- WILD, O., ZHU, X., & PRATHER, M.J. 2000. Fast-J : accurate simulation of in and below cloud photolysis in tropospheric chemical models. *J. Atmos. Chem.*, **37**, 245–282.
- ZIPSER, E. J., DANIEL, J.C., LIU, C., NESBITT, S. W., & YORTY, D. P. 2006. Where are the most intense thunderstorms on Earth? *Bull. Am. Meteorol. Soc.*, **87**, 1057–1071.



Jean-Michel HENRIOT

**Modélisation du transport d'espèces chimiques en période convective pour l'étude de la haute troposphère tropicale en Amérique du Sud**

Résumé :

De nombreux travaux indiquent qu'il est important d'étudier les impacts physico-chimiques de la convection profonde tropicale. Nous avons utilisé le modèle méso-échelle 3D non-hydrostatique CATT-BRAMS pour étudier le transport de traceurs dans la troposphère tropicale au-dessus de l'Amérique du Sud. J'ai effectué une validation de l'outil en complément d'une étude en saison sèche et dans les basses couches menée au CPTEC (Brésil). Les résultats obtenus dans ces travaux indiquent un comportement météorologique globalement correct. Le transport en résultant montre une sur-estimation du transport d'espèces chimiques dans la moyenne troposphère et une sous-estimation dans la haute troposphère. Cela vient d'un déclenchement trop fréquent de la convection restreinte, de la paramétrisation de la convection profonde et de la représentation de leurs interactions. Une adaptation du modèle pour la saison humide est nécessaire. A l'échelle locale des difficultés venant d'une sensibilité importante de la paramétrisation au relief sont rencontrées. Le CATT-BRAMS évolue vers un modèle avec chimie, le C-CATT-BRAMS. Les premiers résultats obtenus indiquent un fort impact de l'initialisation et des conditions aux limites pour les espèces  $NO$  et  $O_3$ . Quelques soient l'initialisation ou les conditions aux limites utilisées, on observe une augmentation du rapport de mélange de ces espèces au cours du temps. Cela peut provenir d'une sur-estimation des émissions à la surface dans le modèle, en particulier pour les méga-cités. Il est important de poursuivre la validation de cet outil afin de pouvoir étudier l'impact physico-chimique de la convection profonde tropicale avec ce modèle.

Mots clés : validation, méso-échelle, haute troposphère, transport d'espèces chimiques, convection restreinte, convection profonde, CATT-BRAMS, C-CATT-BRAMS

**Modelisation of transport of chemical species during convective period for the study of the chemical composition of the tropical troposphere over South America**

Résumé :

Many works show it is important to study the physical and chemical impacts of tropical deep convection. We used the 3D mesoscale non-hydrostatic model CATT-BRAMS to study the tracers transport in the tropical troposphere above South America. I validated the tool parallel to a study done in CPTEC (Brazil) for the dry season and in the lower troposphere. The results obtained in this work indicate a globally correct meteorological behaviour. The associated transport show an over estimation of the chemical species transport in mid-troposphere and an under estimation in the upper troposphere. This comes from a too frequent triggering of shallow convection, from the deep convection scheme and from the representation of their interactions. An adaptation of the model for the wet season is necessary. At local scale, difficulties because of a high deep convection scheme sensitivity to the orography are encountered. The CATT-BRAMS model evolve to a model with chemistry, the C-CATT-BRAMS. The first results obtained indicate a strong impact of initialisation and boundary conditions on species  $NO$  and  $O_3$ . Whatever be the initialisation or the boundary conditions, we observe an increase of the mixing ratio along time for these species. This can come from an over estimation of surface emissions in the model, especially for megacities. It is important to continue the validation of this tool in order to be able to study the physical and chemical impacts of tropical deep convection with this model.

Keywords : validation, mesoscale, upper troposphere, transport of chemical species, shallow convection, deep convection, CATT-BRAMS, C-CATT-BRAMS



LPC2E  
3A avenue de la Recherche Scientifique  
45071 Orléans cedex 2

