

Projet de Thèse 2009

Ecole Doctorale I-MEP2

LEGI UMR 5519 GRENOBLE

Titre de la thèse

Simulation numérique de la turbulence et analyse de scalaires passif et réactif en couche limite atmosphérique stable sur pente modèle, application à la modélisation de la qualité de l'air en vallée.

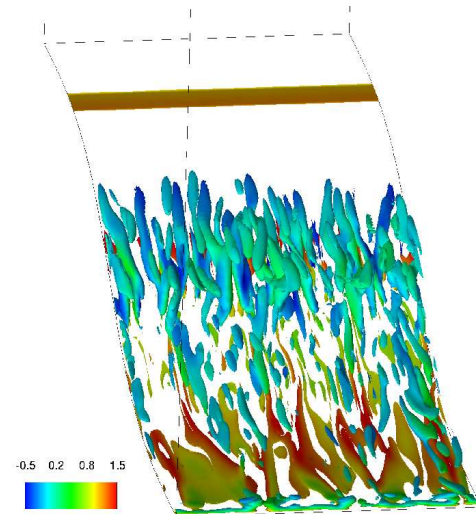
Direction de thèse

Directeur : Christophe Brun (MCF)

Co-directeur : Jean-Pierre Chollet (PR)

Contact : christophe.brun@hmg.inpg.fr

Isovaleurs du critère Q (colorées par la vitesse) de détection de structures turbulentes dans une couche limite atmosphérique stable le long d'une pente.



Description du projet

La modélisation de la couche limite atmosphérique (CLA) en présence de reliefs complexes et pendant les phases de transitoires thermodynamiques est un enjeu important de la caractérisation précise de la dynamique de l'écoulement qui conditionne l'étude du transport de contaminants passifs, potentiellement réactifs [1]. La situation de CLA convective ou neutre est depuis longtemps à la portée de la simulation numérique. Dans le cas de CLA stable, les échelles énergétiques, donc à résoudre explicitement avec les méthodes de simulation modernes de la turbulence telles que la LES (Simulation des Grandes Echelles de la turbulence), sont de plusieurs ordres de grandeur plus petites que la taille du domaine de calcul. Ces situations deviennent tout juste accessibles aux calculateurs aujourd'hui [2, 3].

Le projet concerne la modélisation et la simulation numérique des écoulements atmosphériques sur des pentes, représentatives des situations de reliefs complexes et qui sont fortement dépendants du cycle thermodynamique jour-nuit. Au début de la nuit, l'air est stratifié stablement et le sol, plus froid, le refroidit dans la couche de surface et génère un écoulement catabatique, qui descend le long de la paroi vers la vallée par effet de gravité. Cette phase de transition est particulièrement difficile à décrire et nécessite une résolution fine des gradients de vitesse (jet de paroi) et de température (flux thermique froid en paroi). En plus de la zone de proche paroi, qui est souvent modélisée mais non résolue vue sa complexité, se crée une zone cisailée libre à l'extérieur du jet. Cet écoulement est sujet à une transition à la turbulence initiée par l'apparition de structures tourbillonnaires de Kelvin-Helmholtz. Leur description précise est importante pour la dynamique de l'écoulement turbulent et nécessite une prise en compte fine des gradients locaux.

L'outil de simulation numérique sera le code de calcul Meso-NH (LA-Toulouse, CNRM Météo France) non hydrostatique anélastique, résolvant les équations de Navier-Stokes pseudo-incompressibles avec prise en compte des effets de flottabilité. Le code de calcul permet de modéliser la dynamique de l'atmosphère multi-échelles, de disposer d'une modélisation fine de la physique de l'atmosphère et de la canopée végétale et urbaine, de coupler dynamique et chimie de l'atmosphère. Il est parallélisé (MPI) sur le Nec-SX8 de l'IDRIS et se prête naturellement au calcul intensif à haute résolution. Des simulations numériques LES préliminaires de CLA 3D sur pente modèle et nécessitant 5 millions de points distribués sur 4 à 8 processeurs ont été effectuées en 2008 afin de caractériser l'efficacité du code (figure page 1).

Des simulations à plus de 100 millions de points seront effectuées sur la nouvelle machine Blue Gene installée à l'IDRIS et s'appuieront sur une décomposition de domaine massivement parallèle.

On déterminera la sensibilité d'une configuration d'étude aux conditions aux limites du problème en imposant divers flux de chaleur en paroi pour caractériser le cycle thermodynamique jour/nuit, des niveaux de rugosité variables pour représenter les couverts végétaux ou urbains, des sources de scalaires localisées en espace et en temps pour représenter les charges de polluants. On considérera dans un premier temps des traceurs scalaires passifs. Puis, une partie de la thèse consistera à transposer ces mécanismes au problème du scalaire réactif en utilisant une modélisation simplifiée de la chimie à une réaction élémentaire. Le couplage aux équations de transport de scalaire en LES se traduit par un terme sous-maille supplémentaire, le coefficient de ségrégation sous-maille [1, 4] qui dépend à la fois du mélange et de la vitesse de réaction. Les modèles sous-maille de fermeture pour les flux de quantité de mouvement, les flux de chaleur sensible, les flux de scalaire et le coefficient de ségrégation seront particulièrement étudiés dans le cadre des écoulements stratifiés présents. On proposera des améliorations des modèles existants en particulier concernant les coefficients de diffusion sous-maille [5].

Pour une mise en situation sur site réel, des épisodes hivernaux et/ou nocturnes seront simulés pour des cas de reliefs complexes et de vallées où la stabilité de l'atmosphère peut conduire à des niveaux significatifs de pollution. Les vents de pente et vents de vallée sont ainsi des phénomènes typiques de ces régions. Les inversions y sont souvent plus robustes conduisant à la stagnation de polluants, en particulier la nuit ou en hiver. Ces caractères particuliers sont bien pris en compte dans des simulations numériques réalistes [6]. Des écoulements de pente sont observés en fonction de l'heure de la journée. Cette étude se situe dans la suite des simulations numériques de qualité de l'air déjà effectuées sur des sites réels pour des conditions différentes [7, 8]. Nous examinerons comment se comportent les outils mis en place dans les cas idéalisés sur une situation réaliste en terrain complexe en effectuant des simulations numériques par conditions hivernales ou nocturnes stables. Les résultats ainsi obtenus seront ensuite comparés à des mesures de chimie atmosphérique afin de quantifier l'efficacité des paramétrisations qui auront été préalablement établies.

Références

- [1] F.T.M. Nieuwstadt and Meeder J.P. LES of air pollution dispersion : a review. In *New tools in turbulence modelling*, pages 265–280. Springer, 1996.
- [2] Cuxart J. and Jimenez M.A. Mixing processes in a nocturnal low-level jet : an LES study. *J. of the atmospheric sciences*, 59(17) :2513–2534, 2006.
- [3] E.D. Skillingstad. Large-eddy simulation of katabatic flows. *Boundary Layer Meteor.*, 106 :217–243, 2003.
- [4] J.F. Vinuesa, F. Porté-Agel, S. Basu, and R. Stoll. SGS modeling of reacting scalar fluxes in LES of atmospheric boundary layers. *Environmental Fluid Mechanics.*, 6 :115–131, 2006.
- [5] C. Brun, G. Balarac, da Silva, C.B., and O. Métails. Effects of molecular diffusion on the subgrid-scale modelling of passive scalars. *Physics of Fluids*, 20(2) :025102, 2008.
- [6] E. Chaxel and Chollet. Ozone production from grenoble city during the august 2003 heat wave. *Atmos. Environment*, 2008. in press.
- [7] C. Chemel. Simulations numériques du transport de traceurs passifs dans une atmosphère de vallée. In *Thèse de l'Université Joseph Fourier -Grenoble 1*, 2005.
- [8] E. Chaxel. Photochimie et aérosols en région alpine : mélange et transport. In *Thèse de l'Université Joseph Fourier -Grenoble 1*, 2006.

Connaissances et compétences requises

- Maîtrise des outils numériques de modélisation de la turbulence
- Maîtrise de la programmation en fortran90
- Connaissance en mécanique des fluides et turbulence
- Connaissance en modélisation statistique de la turbulence
- Connaissance en scalaire passif, scalaire réactif, chimie apprécié
- Connaissance des écoulements atmosphériques appréciée