



**HAL**  
open science

# Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS pour l'étude de l'impact de l'ozone sur les grandes cultures

Camille Chambon

► **To cite this version:**

Camille Chambon. Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS pour l'étude de l'impact de l'ozone sur les grandes cultures. Modélisation et simulation. 2018. dumas-01928151

**HAL Id: dumas-01928151**

**<https://dumas.ccsd.cnrs.fr/dumas-01928151>**

Submitted on 20 Nov 2018

**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.

CONSERVATOIRE NATIONAL DES ARTS ET MÉTIERS

PARIS

---

**MÉMOIRE**

présenté en vue d'obtenir

le **DIPLÔME D'INGÉNIEUR CNAM**

**SPÉCIALITÉ** : Informatique

**OPTION** : Modélisation et ingénierie mathématique (IMATH)

par

Camille CHAMBON

---

**Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE  
au moyen du coupleur OASIS pour l'étude de  
l'impact de l'ozone sur les grandes cultures**

Soutenu le 14 juin 2018

---

**JURY**

**PRÉSIDENT :**

M. Philippe DESTUYNDER Professeur, CNAM-Paris

**MEMBRES :**

Mme Juliette LATHIERE Chargée de recherche, LSCE, Rapporteuse

M. Laurent MENUET Directeur de recherche, LMD, Encadrant

M. Jan POLCHER Directeur de recherche, LMD, Co-encadrant

M. Jean-François CASTELL Maître de conférences, EcoSys,  
Co-encadrant

M. José ORELLANA Maître de conférences, CNAM-Paris,  
Examineur

# Remerciements

J'aimerais tout d'abord remercier mes encadrants, Laurent Menut, Jan Polcher et Jean-François Castell, qui m'ont guidé et conseillé tout au long de ce stage. Je remercie également Romain Pennel, pour son aide et sa disponibilité. Merci également à mon tuteur CNAM, Philippe Destuynder, pour ses précieux conseils et pour avoir cru en moi depuis le début de ma formation. Merci à Juliette Lathière d'avoir accepté de rapporter sur mon stage, et à José Orellana d'avoir bien voulu faire partie de mon jury. Enfin, merci à Sylvain Mailler, Solène Turquety, Guillaume Siour et Julien Lenseigne pour leur aide précieuse.

Je tiens également à remercier Philippe Drobinski et Riwal Plougonven pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire pendant toute la durée du stage. Je remercie mon directeur d'unité INRA, Enrique Barriuso, ainsi que mon chef d'équipe, Benjamin Loubet, pour m'avoir aidé à construire mon projet, m'avoir soutenu depuis le début de ma formation, et avoir accepté de me libérer le temps nécessaire à la réalisation de ce stage. Enfin, je remercie la formation permanente de l'INRA pour m'avoir accompagné et avoir financé ma formation.

Pour finir, je remercie également tous mes collègues du LMD (Myrto, Peter, Isabelle, etc.), de l'INRA (Karine, Nadia, Victor, etc.), mes amis et ma famille pour m'avoir soutenu tout au long de ce stage.

Ce stage restera pour moi une très bonne expérience, même si sa réalisation en parallèle des cours au CNAM et de mon travail à l'INRA n'a pas toujours été facile.

# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>2</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>7</b>
1.1 Contexte scientifique et problématique . . . . .	7
1.1.1 L’ozone dans l’atmosphère . . . . .	7
1.1.2 Pollution, ozone et végétation . . . . .	7
1.1.3 Problématique . . . . .	9
1.2 Cadre de l’étude . . . . .	9
1.3 Déroulement du stage . . . . .	10
1.3.1 Travail réalisé . . . . .	10
1.3.1.1 Modèle 0D . . . . .	10
1.3.1.2 Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS . . . . .	11
1.3.2 Encadrement . . . . .	12
1.3.3 Plan du mémoire . . . . .	12
<b>2 Problème posé et travaux antérieurs</b>	<b>14</b>
2.1 Les modèles 0D de la chimie atmosphérique . . . . .	14
2.1.1 Processus de la chimie atmosphérique . . . . .	14
2.1.2 Principe des modèles 0D de la chimie atmosphérique . . . . .	15
2.1.3 Intérêts et limites des modèles 0D . . . . .	17
2.1.4 Recherche de modèles 0D existants . . . . .	17
2.2 Les modèles CHIMERE et ORCHIDEE . . . . .	19
2.2.1 Le modèle CHIMERE . . . . .	19
2.2.2 Le modèle ORCHIDEE . . . . .	19
2.3 Couplage de CHIMERE et d’ORCHIDEE pour l’étude des interac- tions entre l’ozone et la végétation . . . . .	21
2.3.1 Couplage de CHIMERE et d’ORCHIDEE existant . . . . .	21

2.3.1.1	Paramétrisation des rétroactions . . . . .	23
2.3.1.2	Résultats obtenus . . . . .	26
2.3.1.3	Limites du couplage . . . . .	26
2.3.2	Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE avec OASIS . . . . .	29
2.3.2.1	Couplage online . . . . .	29
2.3.2.2	Le coupleur OASIS . . . . .	29
2.3.2.3	Interface CHIMERE-OASIS . . . . .	30
2.3.2.4	Interface ORCHIDEE-OASIS . . . . .	31
2.4	Conclusion . . . . .	32
2.4.1	Modèle 0D . . . . .	32
2.4.2	Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE via OASIS . . . . .	32
<b>3</b>	<b>Modélisation 0D de la chimie de l'ozone troposphérique</b>	<b>34</b>
3.1	Problème à résoudre . . . . .	34
3.2	Solutions proposées . . . . .	36
3.2.1	Mécanisme chimique . . . . .	36
3.2.2	Paramétrisations . . . . .	38
3.2.2.1	Épaisseur de la couche de mélange et dilution . . . . .	39
3.2.2.2	Fréquences de photolyse de l'ozone et du dioxyde d'azote . . . . .	41
3.2.2.3	Dépôts secs . . . . .	42
3.2.2.4	Émissions . . . . .	43
3.2.3	Équations bilan des concentrations . . . . .	47
3.2.3.1	Espèces à l'équilibre quasi stationnaire . . . . .	47
3.2.3.2	Autres espèces . . . . .	48
3.2.4	Implémentation . . . . .	51
3.3	Résultats . . . . .	52
3.3.1	Conditions normales . . . . .	52
3.3.2	Scénario canicule . . . . .	55
3.3.3	Scénario d'émissions . . . . .	56
3.4	Discussion . . . . .	58
3.4.1	Conditions normales . . . . .	58
3.4.1.1	Explication des résultats obtenus . . . . .	58
3.4.1.2	Validation des résultats . . . . .	59
3.4.2	Scénario canicule . . . . .	59

3.4.3	Scénario d'émissions . . . . .	60
3.5	Conclusion . . . . .	60
<b>4</b>	<b>Modélisation 3D des interactions entre la végétation et l'atmosphère : couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE</b>	<b>62</b>
4.1	Problème à résoudre . . . . .	62
4.2	Solutions proposées . . . . .	62
4.2.1	Déploiement des modèles sur le serveur ClimServ . . . . .	63
4.2.2	Préparation des données de forçage . . . . .	64
4.2.2.1	Grille du domaine . . . . .	64
4.2.2.2	Données météos . . . . .	65
4.2.2.3	Autres données de forçage nécessaires . . . . .	69
4.2.2.4	Test des données de forçage . . . . .	69
4.2.3	Implémentation du couplage . . . . .	70
4.2.3.1	Identification des paramètres à échanger . . . . .	70
4.2.3.2	CHIMERE . . . . .	70
4.2.3.3	ORCHIDEE . . . . .	71
4.2.3.4	Interfaces OASIS . . . . .	72
4.2.4	Script pour lancement des modèles en parallèle . . . . .	74
4.3	Résultats . . . . .	76
4.3.1	Simulations réalisées . . . . .	77
4.3.2	Concentration d'ozone à la surface . . . . .	77
4.3.3	Productivité Primaire Nette pour les cultures en C3 et C4 . . . . .	77
4.4	Discussion des résultats . . . . .	79
4.4.1	Concentration d'ozone à la surface . . . . .	79
4.4.2	Productivité Primaire Nette pour les cultures en C3 et C4 . . . . .	82
4.5	Conclusion . . . . .	83
<b>5</b>	<b>Conclusions</b>	<b>84</b>
5.1	Mission et travail réalisés . . . . .	84
5.2	Compétences développées . . . . .	85
5.3	Perspectives . . . . .	85
<b>A</b>	<b>Domaine du couplage CHIMERE-ORCHIDEE</b>	<b>87</b>
<b>B</b>	<b>Déploiement de CHIMERE et d'ORCHIDEE</b>	<b>89</b>
B.1	Choix du serveur . . . . .	89

B.2	Déploiement de CHIMERE . . . . .	89
B.3	Déploiement d'ORCHIDEE . . . . .	90
B.4	Débogage et remonté des anomalies . . . . .	90
<b>C</b>	<b>Préparation des données de forçage météos</b>	<b>92</b>
C.1	Dimensions manquantes . . . . .	92
C.2	Variables manquantes . . . . .	92
<b>D</b>	<b>Types de végétations représentés dans les modèles et mise en correspondance</b>	<b>95</b>
D.1	Types de végétations représentés dans le modèle CHIMERE . . . . .	95
D.2	Types de végétations représentés dans le modèle ORCHIDEE . . . . .	95
D.3	Mise en correspondance . . . . .	95
<b>E</b>	<b>Réception et envoi des données échangées</b>	<b>99</b>
E.1	CHIMERE . . . . .	99
E.1.1	Réception de la conductance stomatique et du LAI . . . . .	99
E.1.2	Envoi des concentrations d'ozone de surface . . . . .	100
E.2	ORCHIDEE . . . . .	100
E.2.1	Choix du driver pour les forçages atmosphériques . . . . .	100
E.2.2	Choix du module de couplage . . . . .	101
E.2.3	Interface ORCHIDEE-OASIS . . . . .	101
<b>F</b>	<b>Calcul de l'impact de l'ozone sur la végétation</b>	<b>103</b>
F.1	Impact de l'ozone sur la PPB . . . . .	103
F.2	Impact de l'ozone sur la conductance stomatique . . . . .	104
<b>G</b>	<b>Piste pour réduire les temps de calcul</b>	<b>106</b>
	<b>Liste des symboles</b>	<b>107</b>
	<b>Résumé</b>	<b>128</b>

# 1. Introduction

## 1.1. Contexte scientifique et problématique

### 1.1.1. L'ozone dans l'atmosphère

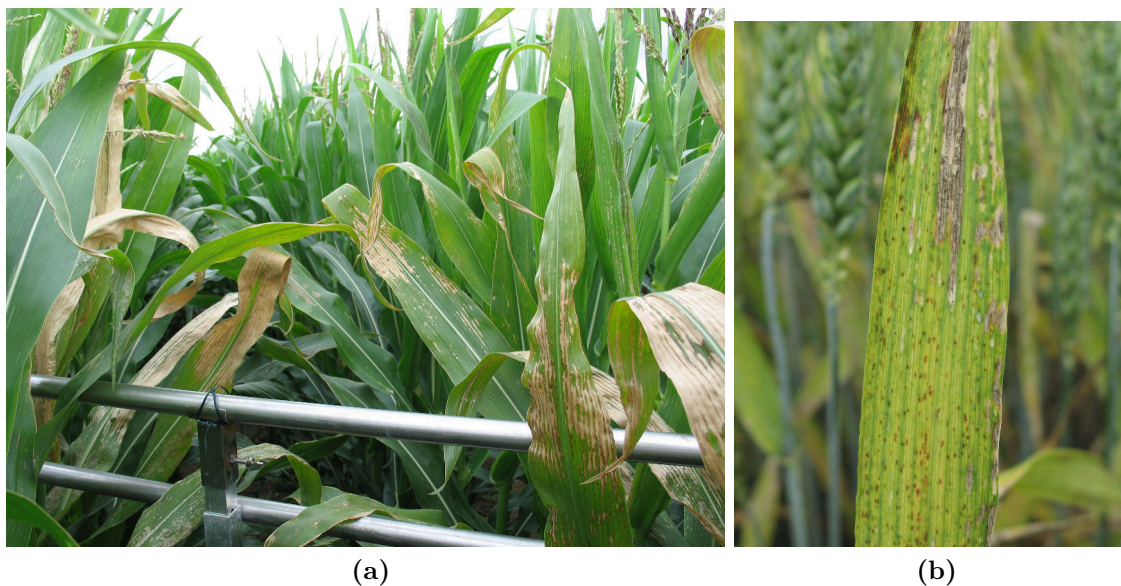
L'ozone ( $O_3$ ) est un gaz plus lourd que l'air, présent dans différentes couches de l'atmosphère. Dans la stratosphère, entre environ 13 et 40 *km* d'altitude, l'ozone forme une couche, la couche d'ozone, qui intercepte plus de 97 % des rayons ultraviolets du Soleil. En deçà de cette altitude, dans la *troposphère*, l'ozone agresse le système respiratoire des animaux et des végétaux les plus sensibles. (Margarete *et al.* (2005) et figure 1.1).

La troposphère est elle-même constituée de plusieurs couches qui jouent un rôle important dans les interactions entre l'ozone et la végétation. Entre la surface et environ 2 *km* d'altitude, la *couche limite planétaire* (CLP) est directement influencée par les processus de surface. Dans cette couche, le transport de quantité de mouvement, de chaleur et d'humidité se fait par turbulence. Au delà de 2 *km* d'altitude se trouve la couche atmosphérique libre, aussi appelée *couche limite atmosphérique* (CLA), dans laquelle la force de frottement générée par la présence de la surface terrestre exerce une influence négligeable sur le mouvement de l'air. L'épaisseur de la CLA change au cours de la journée. (Vranková et Palko, 2016)

### 1.1.2. Pollution, ozone et végétation

L'ozone troposphérique se forme principalement quand un rayonnement solaire élevé favorise les réactions photochimiques nécessaires à sa production, dans les zones où les émissions des polluants *précurseurs de l'ozone* (NOx, *composés organiques volatils* (COV) dont méthane et CO) sont importantes, notamment en raison d'un trafic automobile intense. L'ozone troposphérique est aujourd'hui considéré comme le polluant atmosphérique le plus nocif pour la production des cultures et des forêts, et sa concentration dans l'air devrait encore augmenter dans les prochaines années.





**Figure 1.1.** – Impact de l’ozone sur un champ de maïs (figure 1.1a, Castell, 2011) et sur une feuille de blé (figure 1.1b, Castell, 2009).

On estime que la production des cultures sensibles, comme le blé ou les tomates, peut être réduite de plus de 10 % dans les régions les plus polluées, ce qui représente des pertes sensibles pour l’économie du secteur agricole (Humblot *et al.*, 2013; Castell et Thiec, 2017).

Par ailleurs, la structure et l’activité de la végétation ont un impact important sur la chimie atmosphérique au travers du dépôt de polluants et des émissions de COV (Guenther *et al.*, 2006; Lathiere *et al.*, 2006; Petroff *et al.*, 2008). En effet, plusieurs mécanismes de rétroaction entre la *production primaire brute* (PPB) et l’ozone peuvent influencer sur les interactions entre la végétation et l’atmosphère. Tout d’abord, un stress à l’ozone entraîne une modification de la *conductance stomatique* et peut affecter les vitesses de dépôt sec, et donc les concentrations en ozone dans la canopée (Petroff *et al.*, 2008), ou plus généralement dans la basse atmosphère. Ensuite, un changement dans la conductance stomatique induit des changements dans les *émissions* de COV *biogéniques*, ce qui peut augmenter ou diminuer la concentration en ozone, selon les niveaux d’oxydes d’azote (NOx) présents. Enfin, un stress sévère à l’ozone induit une diminution significative de la PPB et, par conséquent, de la quantité de carbone allouée dans la *biomasse*. En d’autres termes, ce stress peut diminuer le LAI (*Indice de Surface Foliaire*) qui, à son tour, affecte à la fois les émissions de COV biogéniques et les dépôts secs. Toutes ces rétroactions entre l’ozone et

la PPB agissent en modifiant la concentration d’ozone dans la CLP, modulant par conséquent l’amplitude du stress de l’ozone sur la végétation.

### 1.1.3. Problématique

L’impact de l’ozone sur la végétation et les rétroactions de la végétation sur la chimie atmosphérique ne sont pas suffisamment étudiés (Anav *et al.*, 2011). Or, cela permettrait d’obtenir de meilleures estimations des pertes de rendements dues à l’ozone, et ainsi de mieux conseiller les pouvoirs publics pour mettre en œuvre des politiques visant à réduire les niveaux de pollution à l’ozone.

Comment mieux comprendre les effets néfastes de l’ozone sur la végétation en tenant compte des rétroactions entre la végétation et l’atmosphère ?

D’après Anav *et al.* (2012), il est nécessaire, pour répondre à cette question, de coupler des modèles de chimie-transport nouvelle génération à des modèles de la surface terrestre, tels que les modèles CHIMERE (Menut *et al.*, 2013; Mailler *et al.*, 2017) et ORCHIDEE (Polcher *et al.*, 1998; Krinner *et al.*, 2005).

La problématique de ce stage est donc de coupler les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS (Valcke *et al.*, 2013; Craig *et al.*, 2017), pour étudier l’impact de l’ozone sur le rendement des grandes cultures.

## 1.2. Cadre de l’étude

J’ai réalisé ce stage dans le cadre d’un dispositif de formation diplômante proposé par la Formation Permanente de l’INRA. Les travaux de mon unité, ECOSYS, visent notamment à prédire par modélisation les performances agronomiques, environnementales et sanitaires des agrosystèmes sous contrainte des changements globaux (climat, changement d’usage des sols et des pratiques, pollution) (ECOSYS-Web). La formation que j’ai suivie au CNAM est une formation d’ingénieur en modélisation et ingénierie mathématique, qui vise à acquérir des méthodes de simulation numérique pour les sciences de l’ingénieur (CNAM-Web).

Le LMD (Laboratoire de Météorologie Dynamique) est une unité CNRS-ENS-École Polytechnique-UPMC qui étudie notamment le climat et la pollution atmosphérique en développant des modèles de simulation numériques. ECOSYS et le LMD participent à des projets de recherche communs, notamment le projet CLAND (CLAND-Web). Pour répondre aux questions scientifiques que se posent mon unité

et le LMD, tout en mettant en pratique les enseignements que j'ai reçus au cours de ma formation, nous avons donc décidé, mon unité, le LMD, mon tuteur CNAM et moi, que je réaliserais mon stage au LMD, sur le site de l'École Polytechnique à Palaiseau.

Le sujet de ce stage a été défini par rapport à trois objectifs. Le premier, pédagogique, consistait à mieux comprendre les processus complexes intervenant dans les interactions entre l'atmosphère et la végétation. En effet, mon métier à l'INRA étant jusqu'à présent centré sur le développement logiciel de modèles agronomiques, il était nécessaire dans un premier temps de me familiariser avec ces processus. Le second objectif, scientifique, consistait à étudier les interactions entre la chimie atmosphérique et la végétation, cette thématique de recherche intéressant directement le LMD. Enfin, le dernier objectif, professionnel, consistait à quantifier l'impact de l'ozone sur la végétation, et notamment sur les grandes cultures. Ce dernier objectif est en lien avec les activités de mon unité INRA.

## **1.3. Déroulement du stage**

### **1.3.1. Travail réalisé**

Pour atteindre les objectifs définis précédemment, ce stage s'est déroulé en deux parties. La première partie consistait à développer un modèle 0D de la chimie troposphérique. La seconde partie consistait à coupler les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS, et à utiliser ce couplage pour quantifier l'impact de l'ozone sur le rendement des grandes cultures.

#### **1.3.1.1. Modèle 0D**

L'objectif de ce modèle 0D était de simuler numériquement la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement de type urbain, et de réaliser des tests de sensibilité correspondant à différents scénarios environnementaux.

Pour réaliser le modèle 0D de la chimie troposphérique, j'ai donc d'abord identifié les processus physiques et chimiques pilotant la formation et la destruction de l'ozone troposphérique. J'ai ensuite choisi un mécanisme chimique permettant de représenter de façon simplifiée la chimie de l'ozone, ainsi que des paramétrisations décrivant l'évolution temporelle des processus impliqués. J'ai ensuite écrit les

équations bilan des concentrations des espèces chimiques considérées. Puis j'ai implémenté le modèle en langage Python et j'ai intégré le système d'équations avec le solveur LSODA (Livermore Solver for Ordinary Differential Equations). Toutes ces étapes sont détaillées au chapitre 3.

Le développement de ce modèle 0D m'a permis de mieux comprendre les processus complexes pilotant les concentrations de l'ozone dans l'atmosphère, ce qui était un prérequis à la modélisation 3D, avec les modèles CHIMERE et ORCHIDEE, des interactions entre la végétation et l'atmosphère.

### **1.3.1.2. Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS**

La figure 1.2 illustre de façon globale le couplage réalisé.

Pour réaliser le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE avec OASIS, j'ai commencé par identifier les paramètres à échanger entre les modèles. Ces paramètres sont d'une part le LAI, la conductance stomatique, et les émissions de COV biogéniques calculés par ORCHIDEE et envoyés à CHIMERE, et d'autre part les concentrations d'ozone à la surface calculées par CHIMERE et envoyées à ORCHIDEE (respectivement *LAI*, *Gsto*, *COVB* et *O3* sur la figure 1.2).

J'ai ensuite finalisé le déploiement des modèles sur le serveur ClimServ (ClimServ-Web), en utilisant notamment les outils développés par l'IPSL et ses partenaires (OutilsIPSL-Web) (cadre *ClimServ* sur la figure 1.2).

Puis j'ai préparé les données de forçage nécessaires en entrée des modèles (bulles en trait discontinu sur la figure 1.2). Pour les forçages météo, j'ai utilisé des données calculées par le modèle de météorologie WRF (WRF-Web). Pour décrire le sol et la végétation, j'ai utilisé des données issues de bases de données de l'ESA (ESA-Web) et de l'USDA (USDA-Web). Les *émissions anthropiques* ont été générées par le programme *emiSURF* (téléchargeable sur CHIMERE-Web) à partir de données issues de la base de données EMEP (EMEP-Web). Toutes ces données correspondaient aux niveaux de l'année 2013, pour une grille de domaine couvrant la région euro-méditerranéenne (voir Annexe A). Cette grille est celle utilisée pour l'exercice de comparaison de modèles MedCORDEX (MedCORDEX-Web). Ce domaine a été choisi car il s'agit d'un domaine standard, régulièrement utilisé pour les simulations de CHIMERE et d'ORCHIDEE non-couplés, et utilisé dans le cadre du projet RegIPSL (RegIPSL-Web) pour le couplage d'ORCHIDEE avec d'autres modèles. De plus, ce domaine couvre la région qui nous intéresse dans le cadre de ce stage (l'Eu-

rope), et possède une résolution de 20 km suffisante pour étudier les interactions entre l’atmosphère et la végétation.

En parallèle de la préparation des forçages, j’ai implémenté pour chacun des modèles une interface logicielle avec le coupleur OASIS3-MCT (OASIS-Web) (ellipses rouges sur la figure 1.2). Ces interfaces permettent aux modèles de communiquer entre eux en échangeant des données via le coupleur OASIS. J’ai également adapté un script Shell pour pouvoir lancer les deux modèles en parallèle, en utilisant les outils de pré et post-traitement existants pour chacun des modèles.

Enfin, j’ai commencé à tester ce couplage en lançant des simulations au pas de temps horaire pour le mois de janvier 2013, de façon à calculer la PPB impactée par l’ozone (bulle *PPB* sur la figure 1.2).

Toutes ces étapes sont détaillées au chapitre 4.

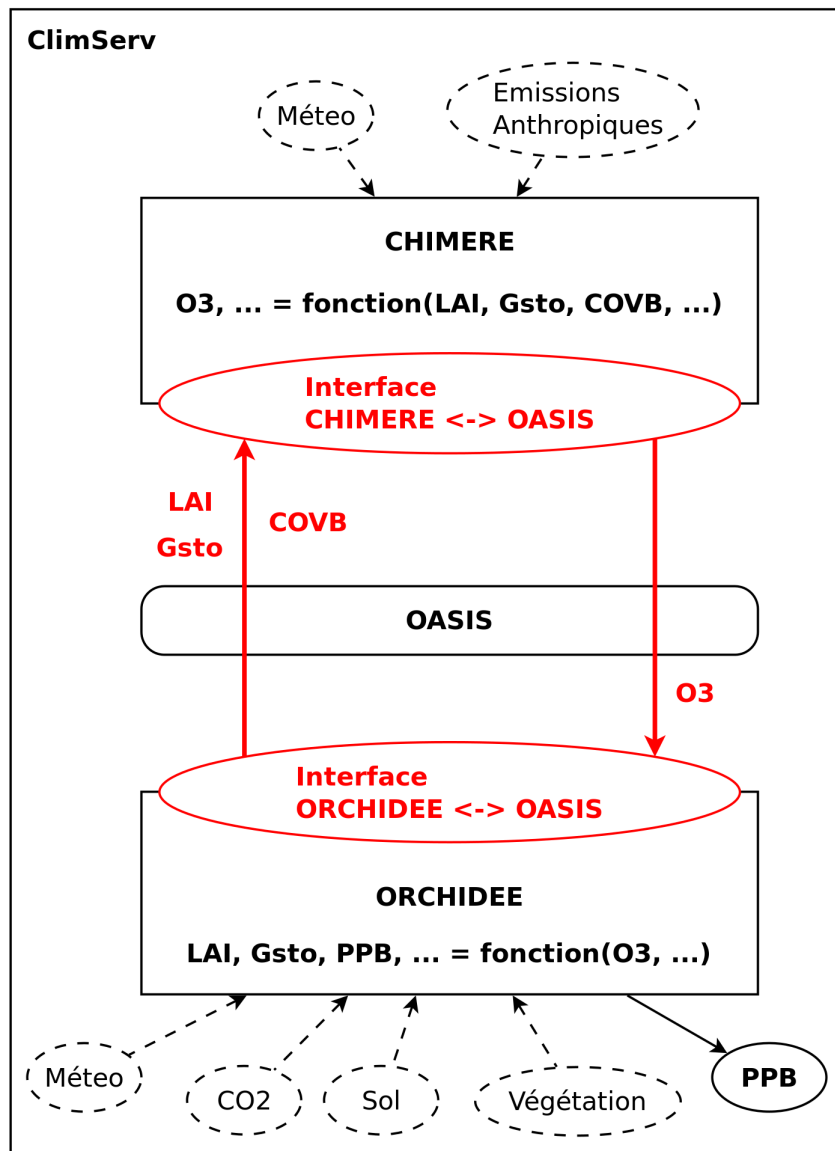
Malheureusement, la préparation des données de forçage météo ayant pris plus de temps que prévu, le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE n’est pas encore opérationnel au moment de la rédaction de ce mémoire.

### **1.3.2. Encadrement**

Pour réaliser ce travail, j’ai été encadré par Laurent Menut et Jan Polcher, tous deux chercheurs au LMD, et travaillant respectivement sur les modèles CHIMERE et ORCHIDEE. J’ai également été suivi par Jean-François Castell, enseignant-chercheur au sein de l’unité ECOSYS, et qui travaille sur les interactions ozone-végétation. J’ai aussi pu bénéficier de l’appui de Romain Pennel, ingénieur au LMD, pour toutes les questions relatives au couplage informatique des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Enfin, j’ai été tutoré par Philippe Destuynder, professeur au CNAM de Paris.

### **1.3.3. Plan du mémoire**

Ce mémoire comprend plusieurs chapitres. Le premier chapitre est une étude bibliographique permettant de bien définir le problème posé, de dresser un bilan de l’existant et d’en identifier les limites. Les deuxième et troisième chapitres décrivent les solutions proposées pour répondre à la problématique ainsi que leur mise en œuvre. Ces chapitres présentent également les résultats obtenus ainsi qu’une discussion permettant de resituer ces résultats dans le contexte scientifique actuel. Enfin, la conclusion de ce mémoire indique brièvement ce qui a été fait et ce qu’il reste à faire.



**Figure 1.2.** – Schéma global du couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS sur le serveur ClimServ. Les données échangées via OASIS sont en rouge (*LAI* : indice de surface foliaire, *Gsto* : conductance stomatique, *COVB* : émissions de COV biogéniques, *O3* : concentrations d’ozone). Les bulles en trait discontinu représentent les données de forçage. La bulle en trait plein (*PPB*) représente la production primaire brute calculée par ORCHIDEE. C’est cette *PPB* qui permet ensuite de calculer le rendement des cultures.

## 2. Problème posé et travaux antérieurs

D'après Anav *et al.* (2012), il est nécessaire, pour mieux comprendre les interactions entre l'ozone troposphérique et la végétation, de coupler des modèles de chimie-transport nouvelle génération à des modèles de la surface terrestre, tels que les modèles CHIMERE (Menut *et al.*, 2013; Mailler *et al.*, 2017) et ORCHIDEE (Polcher *et al.*, 1998; Krinner *et al.*, 2005).

La problématique de ce stage était donc de coupler les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS.

Cependant, la réalisation de ce couplage nécessitait au préalable la compréhension des processus complexes intervenant dans ces modèles. C'est pourquoi j'ai choisi de commencer ce stage par le développement d'un modèle 0D de la chimie troposphérique.

Cette partie représente une étude bibliographique qui vise à faire le point sur les travaux antérieurs en lien avec cette problématique et sur leurs limites.

Les éléments importants à traiter dans cette étude sont donc les modèles 0D de la chimie atmosphérique, les modèles CHIMERE et ORCHIDEE, et les couplages existants de CHIMERE et d'ORCHIDEE. Le plan de cette étude suit donc ces différents points.

### 2.1. Les modèles 0D de la chimie atmosphérique

Cette section explique le principe et l'intérêt des modèles 0D, et dresse un bilan des modèles 0D existants et permettant de décrire la chimie atmosphérique.

#### 2.1.1. Processus de la chimie atmosphérique

Les concentrations des espèces chimiques dans l'atmosphère sont pilotées par quatre types de processus.

D'abord, des espèces chimiques peuvent être émises dans l'atmosphère par diverses sources. Certaines de ces sources, telles que la combustion de combustibles fossiles, proviennent de l'activité humaine et sont appelées anthropiques. D'autres, comme l'oxygène formé lors de la photosynthèse, proviennent des fonctions naturelles des organismes biologiques et sont appelées biogéniques. D'autres encore, tels que les volcans, proviennent de processus naturels non biogéniques. Tous ces processus sont des processus d'**émissions**. Parmi ces émissions, les émissions de COV sont à 90 % d'origine naturelle et à 10 % d'origine anthropique (Guenther *et al.*, 1995), et les émissions de NOx sont à 80 % d'origine anthropique et à 20 % d'origine naturelle (Bisson *et al.*, 1997).

L'atmosphère est également le lieu de nombreuses réactions chimiques et photochimiques, qui peuvent entraîner la formation et l'élimination de différentes espèces chimiques, notamment sous l'effet du rayonnement solaire. Ce sont ce qu'on appelle les processus **chimiques**.

Ensuite, le vent peut transporter les espèces chimiques atmosphériques à l'écart de leur point d'origine, autrement dit de leur source d'émission ou de formation. Ce sont les processus de **transport**. Ces mouvements sont déterminés par trois forces principales : la gravité, le gradient de pression et la force de Coriolis.

Enfin, la dispersion de l'atmosphère vers l'espace étant négligeable en raison de l'attraction gravitationnelle de la Terre, toute la matière en suspension dans l'atmosphère finit par se déposer à la surface. Ce sont les processus de **dépôt**. Ces processus peuvent prendre deux formes : le dépôt sec impliquant une réaction directe ou une absorption à la surface de la Terre, comme l'absorption du CO<sub>2</sub> lors de la photosynthèse, et le dépôt humide résultant du lavage de l'atmosphère par les précipitations.

### 2.1.2. Principe des modèles 0D de la chimie atmosphérique

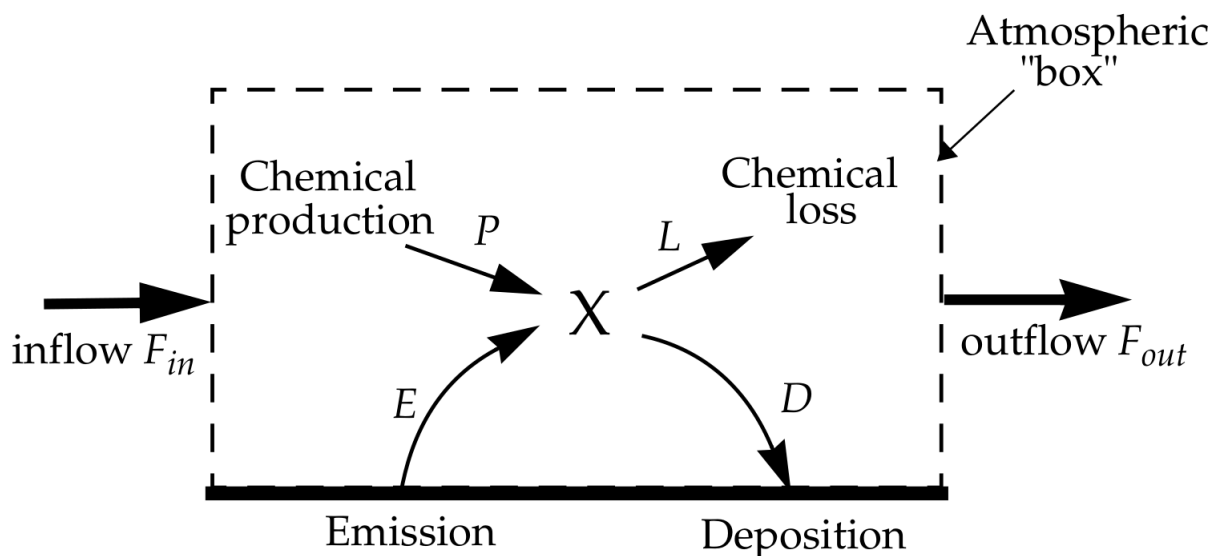
Pour étudier les processus de la chimie atmosphérique, les chercheurs ont notamment recours à des modèles 0D.

Un modèle 0D de la chimie atmosphérique est représenté par une ou plusieurs boîtes dans lesquelles évoluent les concentrations de différentes espèces chimiques au cours du temps.

La figure 2.1 représente le principe de fonctionnement d'un modèle 0D à boîte unique pour une espèce atmosphérique  $X$  donnée.

Dans ce type de modèle, la boîte correspond à un domaine atmosphérique sélec-





**Figure 2.1.** – Modèle 0D pour une espèce atmosphérique X. (Jacob, 1999)

tionné. Le transport est traité comme un flux de  $X$  entrant ( $F_{in}$ ) ou sortant ( $F_{out}$ ). Les variations de  $X$  peuvent être calculées en tenant compte des émissions ( $E$ ), des productions ( $P$ ) et pertes ( $L$ , pour *Loss*) chimiques, et du dépôt ( $D$ ). Les termes  $F_{in}$ ,  $E$  et  $P$  sont des *sources* de  $X$  (ils augmentent la quantité de  $X$  dans la boîte). Les termes  $F_{out}$ ,  $L$  et  $D$  sont des *puits* de  $X$  (ils diminuent la quantité de  $X$  dans la boîte).

La masse de  $X$  dans la boîte est souvent appelée *inventaire* et la boîte elle-même est souvent appelée *réservoir*. Pour qu'il y ait conservation de la masse, et donc que l'*équation de continuité* soit satisfaite, il faut que la variation de la concentration de  $X$  soit égale à la différence entre les sources et les puits.

Ce type de modèle ne résout pas la distribution spatiale de la concentration des espèces chimiques considérées, et il est souvent fait l'hypothèse que les concentrations sont instantanément bien mélangées dans le volume considéré afin de faciliter le calcul des sources et des puits.

Les modèles 0D à boîte unique sont des outils très simples pour décrire l'évolution chimique des espèces dans l'atmosphère. Cependant, la simplification drastique du transport est souvent inacceptable. En outre, le modèle n'offre aucune information sur les gradients de concentration dans la boîte. (Jacob, 1999)

### 2.1.3. Intérêts et limites des modèles 0D

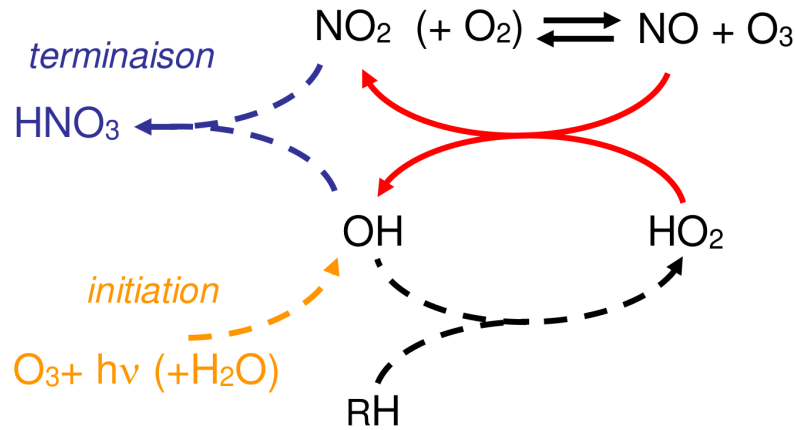
En raison de la complexité et de la variabilité des processus impliqués, l'équation de continuité ne peut être résolue exactement dans les modèles 3D de la chimie atmosphérique. Les simplifications faites dans les modèles 0D permettent d'obtenir des solutions approchées de cette équation de continuité, et ainsi d'étudier le cycle géochimique des éléments (Jacob, 1999). Les modèles 0D permettent de quantifier la production et la perte d'espèces réactives dans un système chimique en tenant compte de processus complexes, et de tester des hypothèses grâce à des simulations de sensibilité ciblées et à leur comparaison avec des observations (Wolfe *et al.*, 2016).

Les modèles de boîtes ne simulent pas explicitement les processus de transport horizontaux et verticaux, et les conditions aux limites peuvent donc influencer fortement sur les concentrations des espèces chimiques à durée de vie moyenne ou longue. De plus, on fait souvent l'hypothèse de l'*état stationnaire* lorsque l'on force ou que l'on compare un modèle avec des données mesurées. Cette hypothèse est invalide dans certaines situations (par exemple, près de sources d'émission fortes ou variables), et l'historique d'une masse d'air n'est pas toujours connue. Enfin, les constantes de vitesse chimique et les données de forçage comportent des incertitudes significatives, et la façon dont se propagent ces incertitudes n'est pas toujours claire. Pour toutes ces raisons, les modèles de boîtes ne permettent pas en général d'obtenir des résultats réalistes (Wolfe *et al.*, 2016).

### 2.1.4. Recherche de modèles 0D existants

Les modèles 0D sont couramment utilisés pour les comparaisons de mécanismes chimiques (Archibald *et al.*, 2010; Coates et Butler, 2015; Emmerson et Evans, 2009; Knote *et al.*, 2015). Plusieurs de ces modèles sont disponibles gratuitement, tels que les modèles DS-MACC (Emmerson et Evans, 2009), CAABA (Sander *et al.*, 2011) et BOXMOX (Knote *et al.*, 2015). Les mécanismes chimiques utilisés dans ces modèles font intervenir de nombreuses espèces et réactions chimiques. Par exemple, le modèle DS-MACC utilise le schéma chimique MCM qui comporte environ 5600 espèces chimiques et 13500 réactions (Bloss *et al.*, 2005). Ces mécanismes chimiques complexes sont nécessaires pour simuler de façon complète la chimie atmosphérique.

Des modèles utilisant des mécanismes chimiques plus simples (et donc incomplets) sont utilisés dans le cadre de formations universitaires. Des TP de Masters de l'Université Pierre-et-Marie-Curie (TP-UPMC-Web) et de l'École Polytechnique (TP-



**Figure 2.2.** – Mécanisme chimique simplifié du système NO<sub>x</sub>/RH/O<sub>3</sub>. (MISGE-Web)

Polytechnique-Web) proposent par exemple d'implémenter des modèles 0D pour analyser la sensibilité de l'ozone aux concentrations de polluants primaires. Après quelques tests, je me suis rendu compte que ces modèles ne tendaient pas vers un équilibre. En effet, après seulement quelques heures de simulation, les concentrations d'ozone augmentaient de façon exponentielle, pour atteindre très rapidement des valeurs très supérieures aux valeurs moyennes mesurées habituellement aux latitudes tempérées de l'hémisphère nord (entre 20 et 65 ppb d'après Oltmans *et al.*, 2006). La raison expliquant ce comportement est que ces modèles, très théoriques, ne tenaient pas compte de la photolyse de l'ozone ni des processus de dépôt. L'ozone était donc formé beaucoup plus vite qu'il n'était consommé.

Un autre TP, proposé dans le cadre d'un Master des universités Paris 7 et 12 (MISGE-Web), vise à identifier les processus pilotant la formation de l'ozone, évaluer leur contribution relative sur la formation et la destruction de l'ozone, et simuler numériquement la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement pollué de type urbain. Pour cela, l'évolution journalière des concentrations d'ozone est modélisée à l'aide d'un modèle 0D, dans lequel la chimie de l'ozone est représentée de façon simplifiée à l'aide d'un mécanisme chimique comprenant 7 espèces et 6 réactions (figure 2.2). Les constantes cinétiques associées aux réactions chimiques prises en compte, ainsi que les paramétrisations décrivant notamment les évolutions temporelles des émissions, de l'épaisseur de la *couche de mélange* et des fréquences de *photolyse* sont issues du livre de Jacob (1999).

## 2.2. Les modèles CHIMERE et ORCHIDEE

Cette section décrit brièvement les modèles CHIMERE et ORCHIDEE et leur lien avec la problématique.

### 2.2.1. Le modèle CHIMERE

CHIMERE (Menut *et al.*, 2013; Mailler *et al.*, 2017) est un modèle de chimie-transport développé par le LMD, l'INERIS (Institut National de l'Environnement industriel et des RISques) et le LISA (Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques). C'est un modèle *offline* qui doit être piloté par un modèle atmosphérique (tel que le modèle WRF (Weather Research and Forecasting), de Skamarock *et al.*, 2005), ou forcé par les données issues d'un tel modèle ou de *réanalyses*. CHIMERE calcule, à partir de différents types d'émissions de polluants primaires (oxyde d'azote (NO<sub>x</sub>), oxyde de soufre (SO<sub>x</sub>), ammoniac (NH<sub>3</sub>), particules fines (PM), COV et monoxyde de carbone (CO)), les concentrations de dizaines d'espèces gazeuses et d'aérosols, à des échelles spatiales allant de l'urbain (quelques centaines de kilomètres) à la région (plusieurs milliers de kilomètres).

Les émissions de surface nécessaires à CHIMERE sont constituées d'émissions anthropiques et biogéniques. Les émissions anthropiques proviennent du programme EMEP, un programme de coopération pour le suivi et l'évaluation du transport à longue distance des polluants atmosphériques en Europe (EMEP-Web). Les émissions biogéniques sont diagnostiquées à l'aide du modèle MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature) (Guenther *et al.*, 2006). MEGAN paramétrise l'effet global des conditions environnementales changeantes en utilisant trois variables d'entrée dépendantes du temps et spécifiées en haut de la canopée : la température, le PAR (Rayonnement Photosynthétique Actif) et le LAI. Par conséquent, pour une espèce donnée, le taux d'émission est calculé en fonction d'un facteur d'émission et d'un facteur d'activité d'émission, ce dernier tenant compte des écarts par rapport aux conditions standard de la canopée.

### 2.2.2. Le modèle ORCHIDEE

#### Description générale

ORCHIDEE (ORganizing Carbon and Hydrology In Dynamic EcosystEms) (Polcher *et al.*, 1998; Krinner *et al.*, 2005) est un modèle de la surface terrestre développé

au LMD, au LSCE (Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement) et au LGGE (Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement). Il intègre un modèle de biogéochimie et de biogéographie dynamique. Il simule les interactions entre l'atmosphère et la surface terrestre végétalisée, le *cycle du carbone* terrestre, ainsi que les modifications dans la composition et la distribution de la végétation en réponse au changement climatique.

ORCHIDEE est basé sur trois modules différents. Le premier module, SECHIBA (Schématisation des Échanges Hydriques à l'Interface Biosphère-Atmosphère) (Ducoudré *et al.*, 1993; De Rosnay et Polcher, 1998), décrit les processus rapides (pas de temps horaire), tels que les échanges d'énergie et d'eau entre l'atmosphère et la biosphère et le bilan hydrique du sol. Le second module, STOMATE (Saclay Toulouse Orsay Modèle pour l'Analyse des Ecosystèmes Terrestres) (Krinner *et al.*, 2005), simule la phénologie et la dynamique du carbone de la biosphère terrestre. Enfin, le troisième module, LPJ (Sitch *et al.*, 2003), simule les processus sur le long terme (pas de temps annuel) comprenant la dynamique de la végétation, le feu, l'établissement des jeunes arbres, la compétition pour la lumière et la mortalité des arbres.

ORCHIDEE peut être utilisé soit seul, soit couplé au modèle atmosphérique WRF. Utilisé seul, ORCHIDEE doit être forcé par des jeux de données climatiques.

### **Types de végétation**

Dans le modèle ORCHIDEE, la surface terrestre est décrite comme une mosaïque de treize types fonctionnels de plantes (PFT) incluant le sol nu.

La définition des PFT est basée sur des paramètres écologiques tels que la physiologie des plantes (arbre ou graminée), les feuilles (feuille large ou aiguille), la phénologie (feuillage persistant ou caduque) et la photosynthèse des plantes et graminées (C3 ou C4). Des paramètres biophysiques et biogéochimiques pertinents sont prescrits pour chaque PFT.

La distribution des PFT peut être soit prescrite à partir d'un inventaire d'entrée (mode statique, LPJ désactivé), soit entièrement simulée par le modèle en fonction des conditions climatiques (mode dynamique, LPJ activé). La fraction de l'espace quadrillé couverte par les terres agricoles est toujours prescrite, de sorte que l'étendue des cultures n'est pas affectée par le changement dynamique de la végétation.

L'assimilation des plantes dans le modèle ORCHIDEE est basée sur le modèle de Farquhar (Farquhar *et al.*, 1980). La *respiration de maintenance* est une fonction de chaque compartiment de biomasse vivante et de la température, tandis que la *respiration de croissance* est calculée comme une fraction de la différence entre les

entrées d'assimilation et les sorties de respiration de maintenance de la biomasse végétale.

### **Émissions biogéniques**

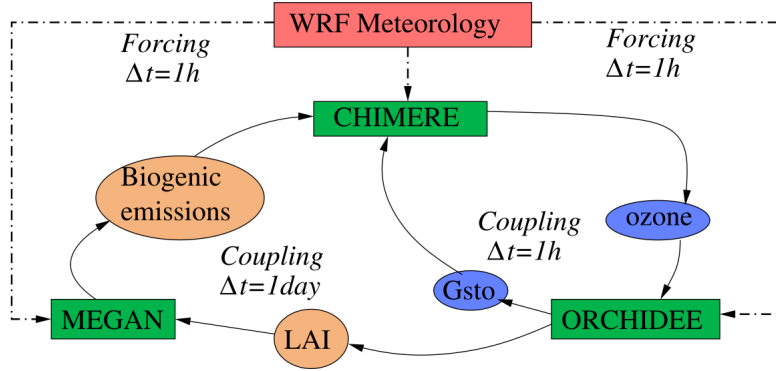
Lathiere *et al.* (2006) ont intégré un schéma d'émissions biogéniques au modèle ORCHIDEE afin de calculer les émissions biogéniques globales de l'isoprène, des monoterpènes, du méthanol, de l'acétone, de l'acétaldéhyde, du formaldéhyde et des acides formique et acétique. Les paramètres importants, tels que l'indice foliaire, sont calculés par ORCHIDEE, et l'influence de l'extinction de la lumière (pour les émissions d'isoprène) et de l'âge des feuilles (pour les émissions d'isoprène et de méthanol) sont également prises en compte.

Messina *et al.* (2016) ont développé une nouvelle version du schéma de Lathiere *et al.* (2006), qui inclut une liste étendue de composés biogéniques émis, des facteurs d'émission mis à jour, une dépendance à la lumière pour presque tous les composés et un schéma radiatif multicouche. Messina *et al.* (2016) ont comparé les résultats de leur modèle aux bilans d'émission les plus récents, et ont montré que les émissions calculées par ORCHIDEE sont dans la fourchette des estimations publiées. Ils ont également comparé les émissions de COV biogéniques calculées par ORCHIDEE à celles calculées par le modèle MEGAN, et ont montré que les bilans d'émission globaux des deux modèles sont, en général, en bon accord. Il ont également montré que les émissions d'ORCHIDEE et de MEGAN sont affectées différemment par les changements de LAI, avec une réponse fortement dépendante du COV considéré.

## **2.3. Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE pour l'étude des interactions entre l'ozone et la végétation**

### **2.3.1. Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE existant**

Anav *et al.* (2012) ont couplé CHIMERE et ORCHIDEE via la conductance de la canopée, le LAI et la concentration d'ozone de surface, comme décrit dans la figure 2.3. Afin de calculer l'impact de l'ozone sur la photosynthèse et les changements induits sur le dépôt sec, la conductance de la canopée et les concentrations d'ozone de surface sont échangées par les modèles au pas de temps horaire, tandis que le LAI est utilisé au pas de temps journalier par le modèle MEGAN pour calculer



**Figure 2.3.** – Diagramme de flux du couplage CHIMERE-ORCHIDEE. Les boîtes vertes représentent les modèles couplés. Les bulles bleues et orange représentent respectivement les variables échangées aux pas de temps horaire et journalier (Gsto : conductance stomatique). CHIMERE et ORCHIDEE sont forcés par des données horaires calculées par le modèle WRF (boîte rouge). Anav *et al.* (2012)

les émissions biogéniques. Dans la version couplée, au lieu d'utiliser l'algorithme multiplicatif développé par Jarvis (1976) pour tenir compte de la conductance de la canopée, CHIMERE utilise la conductance de la canopée calculée directement par ORCHIDEE.

Dans ORCHIDEE, la paramétrisation de la conductance stomatique suit le modèle semi-mécanistique de Ball *et al.* (1987). Combiné à des modèles de photosynthèse (par exemple Farquhar *et al.*, 1980), cet algorithme est devenu de plus en plus populaire pour les simulations de la croissance des plantes. Comme il offre la possibilité de modéliser les changements induits par l'ozone sur le taux de photosynthèse, il est intéressant pour l'évaluation de l'impact de l'ozone (Weinstein *et al.*, 1998). Par conséquent, cet algorithme est bien adapté pour étudier la rétroaction entre l'ozone, la photosynthèse, la conductance de la canopée et la chimie atmosphérique. Dans la paramétrisation de Ball *et al.* (1987), la conductance stomatique  $g_{sto}$  dépend directement de la concentration en  $\text{CO}_2$  ( $C_s$ ) et de l'humidité relative ( $h_s$ ) à la surface de la feuille, et dépend indirectement de la température et du rayonnement au travers de la photosynthèse nette ( $A_n$ ) :

$$g_{sto} = g_0 + \frac{kA_n h_s}{C_s} \quad (2.1)$$

où  $g_0$  est la conductance stomatique résiduelle lorsque  $A_n$  tend vers zéro, et  $k$  est la pente de la relation entre  $g_{sto}$  et l'indice de Ball  $A_n h_s / C_s$ .

Pour une plante dans des conditions normales d'hydratation,  $k$  est constante. Le modèle de Ball devient alors une simple relation linéaire entre  $g_{sto}$  et l'indice Ball  $A_n h_s / C_s$  (Gutschick et Simonneau, 2002).

Cependant,  $k$  varie lorsque la plante est soumise à un stress hydrique, et la relation entre  $g_{sto}$  et l'indice de Ball devient alors curviligne (Sala et Tenhunen, 1996).

### 2.3.1.1. Paramétrisation des rétroactions

#### Impact de l'ozone sur la PPB

Anav *et al.* (2011) ont modifié ORCHIDEE pour inclure les effets de l'ozone sur la photosynthèse. La paramétrisation de ces effets est basée sur la formulation de Felzer *et al.* (2004).

Dans la formulation de Felzer *et al.* (2004), l'ozone impacte la photosynthèse au travers de sa concentration dans les chloroplastes. Cette concentration dépend alors de la concentration atmosphérique et des conditions d'humidité. Les conditions d'humidité sont calculées à partir du rapport entre l'évapotranspiration et l'évapotranspiration potentielle.

ORCHIDEE calculant explicitement la conductance stomatique, Anav *et al.* (2011) ont donc modifié la formulation originale de Felzer *et al.* (2004) pour estimer l'impact de la conductance stomatique sur l'ozone à partir de la conductance stomatique calculée par ORCHIDEE. Ils ont ensuite supposé que la concentration dans le chloroplaste était proportionnelle à la concentration atmosphérique et à la conductance stomatique.

Anav *et al.* (2011) ont ainsi pu estimer l'impact instantané de l'ozone sur l'assimilation,  $I_{O_3inst}$ , représentant le rapport de l'exposition à l'ozone nécessaire pour contrôler la photosynthèse, et exprimé par une valeur sans dimension entre 0 et 1, comme :

$$I_{O_3inst} = \alpha \times g_{sto} \times AOT40 \quad (2.2)$$

où  $g_{sto}$  est la conductance stomatique (en  $mm\ s^{-1}$ ),  $AOT40$  (exposition cumulée au delà du seuil de 40 ppb, exprimée en ppb h) est la concentration horaire d'ozone atmosphérique dépassant le seuil de 40 ppb, et  $\alpha$  (en  $mm^{-1}\ ppb^{-1}$ ) est un coefficient empirique traduisant la réponse de la végétation à l'ozone (Felzer *et al.*, 2004). Les valeurs de  $\alpha$  pour différents types de végétation sont présentés dans le tableau 2.1.



Type de végétation	Coefficient $\alpha$	Référence
Cultures	$3.9 \times 10^{-6}$	Reich (1987)
Conifères	$0.7 \times 10^{-6}$	Reich (1987)
Arbres à feuilles caduques (et autres types de végétation)	$2.6 \times 10^{-6}$	Ollinger <i>et al.</i> (1997)

**Table 2.1.** – Valeurs du coefficient  $\alpha$  (en  $mm^{-1}ppb^{-1}$ ) pour différents types de végétation (la référence propre à chaque coefficient est indiquée dans la troisième colonne du tableau).

Afin de tenir compte des dommages persistants causés par l'exposition antérieure des feuilles à l'ozone, Anav *et al.* (2011) ont également calculé pour chaque mois un impact mensuel moyen de l'ozone sur la photosynthèse ( $I_{O_3\text{month}}$ ). Cet impact mensuel est calculé à partir de l'impact instantané de l'ozone en utilisant la méthode de relaxation linéaire utilisée dans ORCHIDEE pour approximer les variables long terme (Krinner *et al.*, 2005) :

$$I_{O_3\text{month}} = \frac{I_{O_3\text{month}}dt_{\text{month}} + I_{O_3\text{inst}}}{dt_{\text{month}} + 1} \quad (2.3)$$

où  $dt_{\text{month}}$  est le nombre de pas de temps d'ORCHIDEE dans un mois.

Par conséquent, Anav *et al.* (2011) ont défini l'impact réel de l'ozone sur la photosynthèse ( $I_{O_3}$ ) comme :

$$I_{O_3} = \frac{(3I_{O_3\text{month}} + I_{O_3\text{inst}})}{4} \quad (2.4)$$

Les poids respectifs des impacts mensuel ( $3/4$ ) et instantané ( $1/4$ ) ont été calculés de façon empirique, en les ajustant à l'impact de l' $O_3$  observé sur le long terme lors d'expositions à des pics d'ozone.

Finalement, Anav *et al.* (2011) ont calculé la PPB impactée par l'ozone :

$$PPB_{O_3} = PPB (1 - I_{O_3}) \quad (2.5)$$

où  $PPB_{O_3}$  est la PPB impactée par l'ozone, et  $PPB$  est la photosynthèse originale

calculée par ORCHIDEE.

### Impact de l’ozone sur la conductance stomatique

Le dépôt sec de l’ozone est paramétré dans CHIMERE comme un flux descendant d’ozone (en  $\text{moléculesO}_3 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ )

$$\Phi_{\text{O}_3} = -v_{\text{d},\text{O}_3} [\text{O}_3] \quad (2.6)$$

sortant de la couche la plus basse du modèle, avec  $[\text{O}_3]$  (en  $\text{moléculesO}_3 \text{ cm}^{-3}$ ) la concentration d’ozone à une certaine hauteur de référence, et  $v_{\text{d},\text{O}_3}$  la vitesse de dépôt sec de l’ozone (en  $\text{cm s}^{-1}$ ).

$v_{\text{d},\text{O}_3}$  dépend notamment des conductances stomatique et non-stomatique de l’ozone. Ces conductances, exprimées en  $\text{mmolO}_3 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ , correspondent respectivement au flux d’ozone absorbé par la végétation au travers des stomates et au flux d’ozone absorbé par d’autres moyens tels que les feuilles mouillées sénescentes (Le Morvan-Quéméner *et al.*, 2018).

Pour tenir compte de l’impact de l’ozone sur la conductance stomatique, Anav *et al.* (2012) ont utilisé la relation empirique formulée par Felzer *et al.* (2002) :

$$g_{\text{sto},\text{O}_3} = -0.3133 + 0.8126 \times \text{PPB}_{\text{O}_3} \quad (2.7)$$

où  $g_{\text{sto},\text{O}_3}$  et  $\text{PPB}_{\text{O}_3}$  sont respectivement la conductance stomatique (en  $\text{mol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ) et la PPB (en  $\text{TgC année}^{-1}$ ) impactées par l’ozone, et  $-0.3133$  et  $0.8126$  sont des coefficients calculés de façon empirique par Aber et Federer (1992) à partir des données d’Aubuchon *et al.* (1978); Hinckley *et al.* (1978); Abrams *et al.* (1990); Amthor *et al.* (1990). En effet, d’après Aber et Federer (1992), ces données démontrent une relation forte entre le taux absolu de photosynthèse nette et la conductance foliaire mesurée.

C’est cette conductance,  $g_{\text{sto},\text{O}_3}$ , qui est ensuite utilisée par CHIMERE pour le calcul du dépôt sec de l’ozone sur la végétation. Cette paramétrisation ne permet pas de tenir compte de la contribution du dépôt non stomatique dans le calcul de la résistance de surface.

### 2.3.1.2. Résultats obtenus

Avec leur couplage, Anav *et al.* (2012) ont observé une réduction de la PPB d'environ 23 % et une réduction du LAI de 15 à 20 % par rapport à la version non-couplée. La figure 2.4a montre la PPB (en  $\text{gC m}^2 \text{année}^{-1}$ ) calculée par ORCHIDEE couplé à CHIMERE.

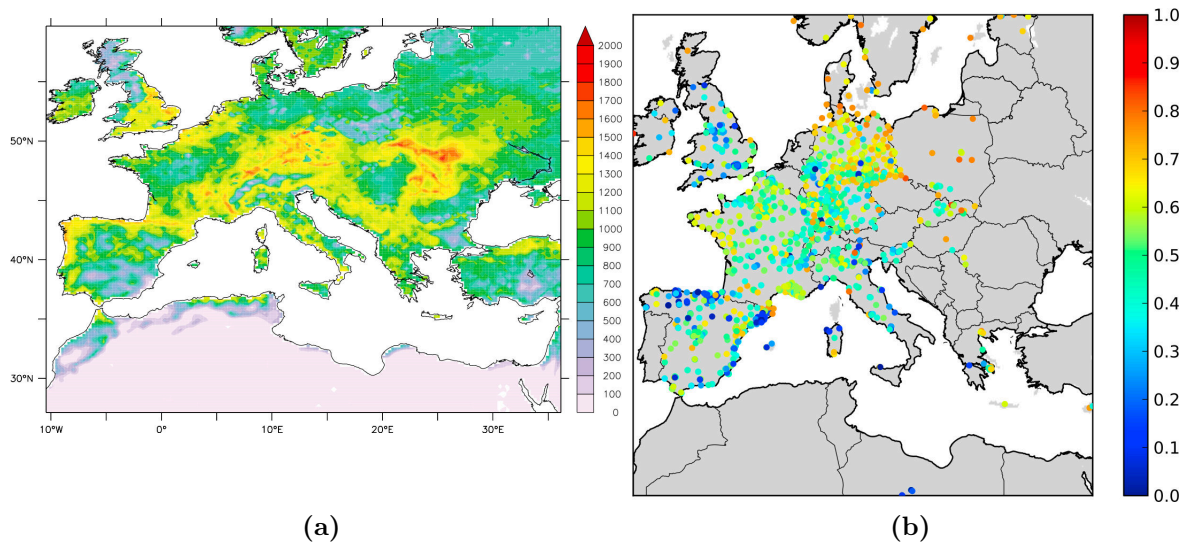
Anav *et al.* (2012) ont observé lors de leur simulation qu'ORCHIDEE décrivait bien la distribution spatiale de la PPB, malgré une sous-estimation non négligeable dans les régions de l'ouest de la France, de l'Irlande et du sud de l'Angleterre, et une surestimation autour des montagnes des Carpates. La figure 2.4b montre l'*indice de vérification* obtenu en comparant la concentration quotidienne moyenne d'ozone calculée par CHIMERE aux observations des réseaux AIRBASE (AirBase-Web) et EMEP (EMEP-Web) pour 1389 stations au sol. D'après Anav *et al.* (2012), leur couplage a permis d'améliorer les performances de CHIMERE en Europe centrale et dans certains sites méditerranéens. Cependant, les performances restent faibles dans la partie sud du domaine, ce qui pourrait s'expliquer par le caractère empirique des coefficients utilisés dans la relation 2.7 (coefficients qui dépendent du climat et du type de végétation), et par la non prise en compte de la contribution du dépôt non stomatique dans le calcul de la résistance de surface (Le Morvan-Quéméner *et al.*, 2018).

Les modèles CHIMERE et ORCHIDEE ont évolué depuis l'étude d'Anav *et al.* (2012). Des résultats différents pourraient donc être observés avec les versions actuelles des modèles, utilisées dans le cadre de ce stage.

### 2.3.1.3. Limites du couplage

#### Émissions biogéniques

Anav *et al.* (2012) ont utilisé les émissions biogéniques calculées par CHIMERE (via le modèle MEGAN). Il serait peut-être plus pertinent, au vu des compartiments physiques modélisés par chacun des modèles et des paramétrisations utilisées, d'utiliser les émissions biogéniques calculées par ORCHIDEE. En effet, si un processus atmosphérique interagit fortement avec les processus de surface (autrement dit si il est fortement couplé à ces processus), et donc que son pas de temps est proche de celui des processus de surface, alors il doit être décrit par le modèle de surface (Polcher *et al.*, 1998). Cette répartition des processus permet de simplifier et de rendre plus flexible les couplages entre les modèles, et d'accroître le potentiel de réutilisation de



**Figure 2.4.** – Résultats du couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE réalisé par Anav *et al.* (2012). La figure 2.4a représente la PPB annuelle (en  $\text{gC m}^2 \text{année}^{-1}$ ) calculée par ORCHIDEE. La figure 2.4b montre l'indice de vérification obtenu en comparant la concentration quotidienne moyenne d'ozone calculée par CHIMERE aux observations des réseaux AIRBASE (AirBase-Web) et EMEP (EMEP-Web) pour 1389 stations au sol (1 : les concentrations calculées par CHIMERE sont identiques à celles mesurées ; 0 : les concentrations calculées par CHIMERE sont très différentes de celles mesurées). (Anav *et al.*, 2012)

chacun des modèles. De plus, d'après Messina *et al.* (2016), ORCHIDEE est plus sensible aux variations de LAI que le modèle MEGAN pour le calcul des émissions biogéniques. L'utilisation du module de calcul des émissions biogéniques d'ORCHIDEE pourrait donc permettre de mieux tenir compte des variations du LAI dans le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE.

### **Contribution du dépôt non-stomatique**

Par ailleurs, Anav *et al.* (2012) n'ont pas tenu compte dans leur paramétrisation de la contribution du dépôt non stomatique dans le calcul de la résistance de surface. Or, Le Morvan-Quéméner *et al.* (2018) ont montré que cette contribution n'était pas négligeable. La prise en compte de cette contribution permettrait donc de mieux estimer la vitesse de dépôt de l'ozone sur la végétation, et ainsi de calculer des concentrations d'ozone plus réalistes.

### **Paramétrisation de l'impact de l'ozone sur la végétation**

Pour estimer l'impact de l'ozone sur la végétation, Anav *et al.* (2012) ont utilisé l'AOT40, un indicateur basé sur les concentrations en polluant. Or, d'après Mills *et al.* (2011), les relations flux-impact obtenues à partir des indicateurs de flux comme le  $POD_y$  semblent plus performantes que les relations dose-impacts fondées sur les indicateurs de concentrations comme l'AOT40. L'utilisation de relations flux-impact pour estimer l'impact de l'ozone sur la végétation est donc une piste possible d'amélioration de ce couplage.

### **Échange des données du couplage**

Au niveau de l'implémentation, le couplage d'Anav *et al.* (2012) lisait et écrivait les fichiers d'entrées et de sorties des modèles couplés sur le disque dur. Ces lectures et écritures augmentaient considérablement les temps de calcul, et rendaient difficile l'utilisation d'un pas de temps inférieur à la journée pour l'échange du LAI et des émissions biogéniques entre le modèle MEGAN et les modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Un couplage des modèles au moyen du coupleur OASIS éviterait ces lectures et écritures et permettrait sans doute d'améliorer les performances de calcul (Craig *et al.*, 2017). Cela rendrait alors possible l'utilisation d'un pas de temps inférieur à la journée pour l'échange du LAI et des émissions biogéniques entre le modèle MEGAN et les modèles CHIMERE et ORCHIDEE, et permettrait ainsi d'améliorer la précision des modèles couplés.

## 2.3.2. Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE avec OASIS

Cette section s'intéresse aux couplages existants de CHIMERE et d'ORCHIDEE avec le coupleur OASIS.

### 2.3.2.1. Couplage online

Le couplage de modèles *online* permet d'exécuter simultanément plusieurs modèles et de faire communiquer ces modèles entre eux. Cela permet de modéliser des rétroactions, car les modèles peuvent alors interagir dans les deux sens à chaque pas de temps.

Pour faire du couplage online de modèles, il est possible de fusionner les modèles en un seul (les modèles CHIMERE et MEGAN par exemple). Cependant, une fois les modèles fusionnés, il peut être difficile de les faire évoluer indépendamment. Cela peut notamment poser problème lorsque les modèles fusionnés sont développés par des équipes de modélisation indépendantes, ou lorsque plus de deux modèles doivent être couplés.

L'utilisation d'un coupleur externe pour gérer les échanges de variables est une bonne alternative à la fusion des modèles. Elle consiste à interfacier chaque modèle avec le coupleur, ce qui permet aux modèles de pouvoir continuer à évoluer indépendamment. De plus, le coupleur peut effectuer certaines opérations sur les données échangées, telles que des interpolations. Cette approche permet également de mieux partager les développements des modèles entre différents groupes de recherche tout en permettant à chaque groupe de continuer à administrer son propre modèle. Plusieurs couplages de modèles online, tels que WRF-CMAQ (Wong *et al.*, 2012), CNRM-CM5 (Voltaire *et al.*, 2013) ou MPI-ESM (Giorgetta Marco A. *et al.*, 2013; Jungclaus J. H. *et al.*, 2013), utilisent cette méthode.

### 2.3.2.2. Le coupleur OASIS

OASIS (Ocean Atmosphere Sea Ice Soil) (Valcke *et al.*, 2013; Craig *et al.*, 2017) est un coupleur de modèles externe développé par le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) et très utilisé pour faire du couplage online de modèles.

OASIS est une bibliothèque logicielle permettant l'interpolation et l'échange synchrone d'informations entre des modèles 2D ou 3D s'exécutant à différentes échelles spatiales ou temporelles. OASIS réalise les transformations spatiales (telles que le

remaillage) et les échanges d’informations en parallèle au moyen de la bibliothèque MPI (Message Passing Interface). OASIS supporte le format NetCDF (Network Common Data Form) pour les entrées et sorties. Les données échangées et les paramètres du couplage sont renseignés dans un fichier de configuration appelé *namcouple*.

Plusieurs modèles de géosciences tels que ECHAM (Stevens Bjorn *et al.*, 2013), LMDz (Hourdin *et al.*, 2006) et ORCHIDEE (Krinner *et al.*, 2005) ont notamment été interfacés avec OASIS, et font partie de modèles couplés online de simulation climatiques tels que EC-earth (Sterl *et al.*, 2012) et IPSL-CM5 (Dufresne *et al.*, 2013).

La dernière version d’OASIS est OASIS3-MCT 3.0. Elle est téléchargeable depuis le site web du coupleur (OASIS-Web). Ce site met également à disposition de la documentation et des tutoriels.

### **2.3.2.3. Interface CHIMERE-OASIS**

Briant *et al.* (2017) ont récemment couplé les modèles CHIMERE et WRF avec OASIS pour modéliser les interactions entre les aérosols et les radiations, en échangeant les données météorologiques calculées par WRF et les propriétés optiques des aérosols calculées par CHIMERE.

Pour cela, Briant *et al.* (2017) ont développé dans CHIMERE le module CHISIS (CHImere/oaSIS), qui joue le rôle d’interface entre CHIMERE et OASIS. CHISIS contient des sous-programmes génériques permettant à CHIMERE de communiquer avec WRF et facilitant le couplage de CHIMERE avec d’autres modèles. De plus, CHISIS permet à CHIMERE de lire le fichier *namcouple* d’OASIS pour, par exemple, allouer de façon dynamique les variables échangées entre les modèles.

De nouveaux scripts ont été développés dans CHIMERE pour permettre la compilation et le lancement de CHIMERE seul ou de CHIMERE couplé à WRF. En mode couplé, des options permettent de réaliser différents scénarios de couplage : couplage sans rétroaction ou couplage avec effets des aérosols sur la météorologie. Ces scripts permettent également de générer automatiquement le fichier *namcouple* d’OASIS.

OASIS permet d’échanger des variables 1D et 2D, mais pas des variables 3D. Or, CHIMERE calcule aussi des variables 3D (comme, par exemple, les champs de concentrations dans l’atmosphère). Pour envoyer des variables 2D et 3D à d’autres modèles, CHIMERE les décompose donc d’abord en tableaux 1D linéarisés. De

même, CHIMERE reçoit les données des autres modèles sous forme de tableaux 1D linéarisés, à partir desquels il reconstruit ses variables 2D et 3D. Pour assurer ces décompositions et ces reconstructions, une grille 1D prédéfinie doit être associée à chaque variable 2D ou 3D envoyée ou reçue par CHIMERE. Par exemple, pour pouvoir envoyer ou recevoir des variables 2D, il faut définir dans CHIMERE une grille 1D de taille  $nlon \times nlat$  ( $nlon$  et  $nlat$  : nombre de divisions en longitude et latitude). Pour les variables 3D, il faut définir une grille de taille  $nlon \times nlat \times nvert$  ( $nvert$  : nombre de divisions verticales). Enfin, pour les variables 3D dites « décalées verticalement », il faut définir une grille de taille  $nlon \times nlat \times (nvert + 1)$ . Ensuite, quelle que soit la taille des variables à échanger, c'est aux différents modèles qu'il appartient de faire la mise en correspondance entre les tableaux 1D échangés et leurs variables. CHIMERE étant jusqu'à présent couplé uniquement au modèle WRF, pour le moment seules les grilles 1D associées aux tailles des variables à échanger avec le modèle WRF sont définies dans l'interface CHISIS.

#### 2.3.2.4. Interface ORCHIDEE-OASIS

Dans le cadre des projets MORCE (Drobinski *et al.*, 2012) et RegIPSL (?Polcher *et al.*, 2018), un couplage via OASIS des modèles WRF et ORCHIDEE a été réalisé, et le couplage du modèle océanique NEMO (NEMO-Web) avec ORCHIDEE est en cours de développement. Ces projets visent à développer un ESM (*Modèle Système Terre*) Régional pour la région méditerranéenne, pour étudier notamment les interactions entre la surface et l'atmosphère.

Pour réaliser ces couplages, des interfaces OASIS ont été développées pour chacun des modèles. Ces interfaces permettent d'une part d'échanger des variables entre les modèles, mais aussi de forcer les modèles à partir de données pré-calculées.

Les données échangées entre les modèles sont décrites sur la page web du projet RegIPSL (RegIPSL-Web). Ce site indique également les versions des modèles utilisées pour les couplages.

Actuellement, les simulations couplant WRF et ORCHIDEE via OASIS peuvent être lancées via la bibliothèque libIGCM (OutilsIPSL-Web). Il existe également un script Shell permettant d'utiliser OASIS pour lancer ORCHIDEE seul à partir de données de forçage.



## 2.4. Conclusion

### 2.4.1. Modèle 0D

Pour simuler la chimie atmosphérique de façon complète, les modèles 0D publiés dans la littérature scientifique utilisent des mécanismes chimiques complexes. Des modèles 0D utilisant des mécanismes plus simples sont néanmoins présentés dans le cadre de formations universitaires.

Parmi ces modèles à visée pédagogique, certains négligent trop de processus et ne permettent pas au système de se maintenir à l'équilibre pendant plus de quelques heures. Ils ne sont donc pas utilisables pour simuler des scénarios de pollution sur plusieurs jours.

Un des modèles trouvés semble cependant proposer un mécanisme chimique et des paramétrisations (couche de mélange, fréquences de photolyses, dépôt sec, émissions et dilution) suffisants. Ce modèle 0D devrait me permettre de simuler numériquement la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement de type urbain.

Il s'agira donc, dans le cadre de ce stage, de reprendre ce TP en vérifiant et en expliquant les paramétrisations utilisées, d'écrire les équations bilans des réactions, d'implémenter le modèle en langage Python, et de réaliser des tests de sensibilités correspondant à différents scénarios de pollution.

### 2.4.2. Couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE via OASIS

Anav *et al.* (2012) ont développé il y a quelques années un couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE, permettant de quantifier les interactions entre l'ozone troposphérique et la végétation, au travers notamment de rétroactions entre l'ozone, la PPB et la conductance stomatique. Ce couplage n'utilisait pas le coupleur OASIS. De plus, le dépôt non stomatique n'était pas pris en compte dans le calcul de la résistance de surface, et CHIMERE utilisait les émissions biogéniques calculées par MEGAN. Enfin, les échanges de données entre les modèles se faisaient par lectures et écritures sur disque, et le code de ce couplage n'a pas été maintenu.

L'utilisation du coupleur OASIS pour le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE permettrait d'éviter d'échanger les données de couplage par lectures et écritures sur disque, et favoriserait l'interopérabilité des modèles par la suite. L'utilisation par CHIMERE des émissions biogéniques calculées par ORCHIDEE permet-

trait de mieux répartir les processus entre les modèles, et de tester plus facilement de nouvelles paramétrisations. Enfin, la prise en compte du dépôt non stomatique dans le calcul de la résistance de surface permettrait de mieux estimer la vitesse de dépôt sec de l’ozone sur la végétation et ainsi de calculer des concentrations d’ozone plus justes.

Il n’existe pas encore à l’heure actuelle de couplage de CHIMERE et d’ORCHIDEE via OASIS. Mon travail consistera donc à identifier dans le code des modèles les paramètres à échanger, développer les interfaces nécessaires au couplage des modèles avec OASIS, déployer les modèles sur le serveur ClimServ, et tester le couplage réalisé en lançant des simulations et en calculant la PPB impactée par l’ozone.

# 3. Modélisation 0D de la chimie de l’ozone troposphérique

Ce chapitre décrit les solutions techniques choisies pour développer le modèle 0D, ainsi que les résultats obtenus.

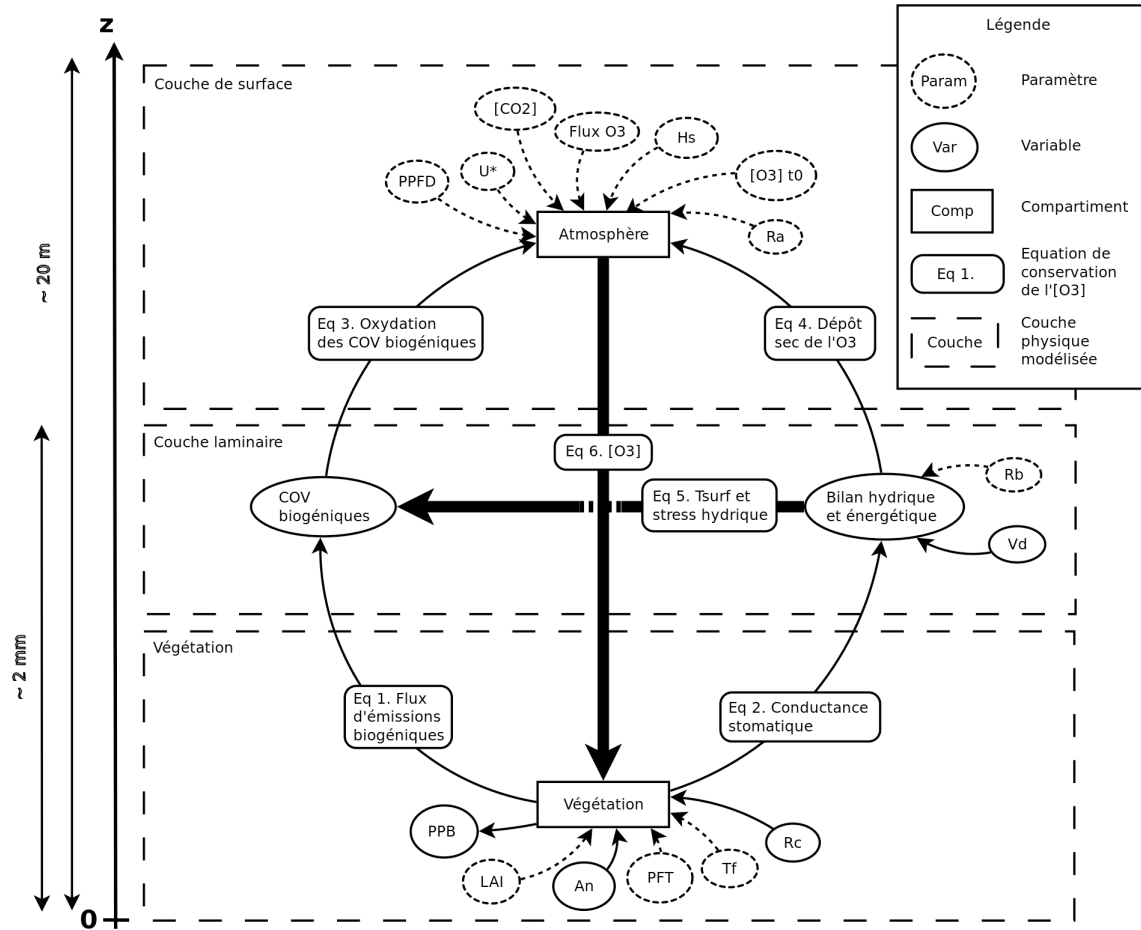
## 3.1. Problème à résoudre

La problématique de ce stage consistait à coupler les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS, en tenant compte des interactions entre l’ozone troposphérique et la végétation, afin d’estimer l’impact de l’ozone sur le rendement des grandes cultures.

Ces interactions peuvent être représentées en utilisant le concept des compartiments géophysiques, présenté à la figure 3.1. Dans ce schéma, les compartiments (végétation et atmosphère) interagissent au travers d’équations de conservation des concentrations d’ozone ( $[O_3]$ , équations 1 à 6) et échangent des variables (COV biogéniques, bilans hydrique et énergétique), le tout au sein de trois couches verticales (couches de surface, couche laminaire et végétation) sur une épaisseur totale d’environ 20 m. Ces compartiments sont également soumis à des facteurs environnementaux (rayonnement, vitesse de frottement, flux entrant, couverture du sol, type de plantes, résistance au dépôt, etc.) qui les impactent. Réciproquement, les processus intervenant dans ces compartiments peuvent également impacter cet environnement (production de biomasse, concentration d’ozone).

Toutes ces interactions sont complexes, et donc difficiles à comprendre et à modéliser, d’autant plus quand le domaine modélisé est en trois dimensions (Wolfe *et al.*, 2016).

De plus, les concentrations de l’ozone sont pilotées par un ensemble de processus eux aussi complexes : émissions de précurseurs, réactions chimiques et photochimiques, mélanges turbulents dans la couche limite atmosphérique, advection et



**Figure 3.1.** – Schéma conceptuel des compartiments géophysiques où se déroulent les interactions entre l’ozone troposphérique et la végétation. *PPFD* : densité de flux de photons photosynthétiques,  $u^*$  : vitesse de frottement,  $[CO_2]$  : concentration en  $CO_2$ ,  $H_s$  : humidité relative,  $[O_3]_0$  et  $[O_3]$  : concentrations d’ $O_3$  initiale et courante,  $R_a$  : résistance aérodynamique,  $R_b$  : résistance quasi-laminaire,  $R_c$  : résistance de surface,  $v_d$  : vitesse de dépôt,  $T_f$  : température des feuilles, *PFT* : type de plante fonctionnel,  $A_n$  : photosynthèse nette, *LAI* : indice de surface foliaire, *PPB* : production primaire brute,  $T_{surf}$  : température à la surface.

dépôt.

Or, le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE nécessite au préalable de comprendre ces processus et ces interactions.

## 3.2. Solutions proposées

Les modèles 0D, aussi appelés modèles « boîte », permettent de mieux comprendre les processus pilotant la composition chimique de l’atmosphère, et de tester des hypothèses grâce à des simulations de sensibilité ciblées et à leur comparaison avec des observations (Wolfe *et al.*, 2016).

Pour répondre à la problématique, j’ai donc choisi de développer un modèle 0D simple de la chimie de l’ozone troposphérique, en m’appuyant sur les paramétrisations et le mécanisme chimique proposés pour un TP sur la dynamique de la pollution atmosphérique (M1SGE-Web). Les valeurs des paramètres utilisées dans ce modèle correspondent aux valeurs habituellement observées en été dans les environnements de type urbain des régions tempérées de l’hémisphère nord, et sont issues du livre de Jacob (1999).

Le modèle 0D développé permet de mieux comprendre la chimie de l’ozone en milieu urbain, et les interactions entre l’ozone troposphérique et la surface. Cependant, de part les paramétrisations utilisées (dépôt et émissions), ce modèle ne décrit pas les interactions entre l’ozone et la végétation.

Le développement de ce modèle a d’abord consisté à définir et expliquer le mécanisme chimique et les paramétrisations utilisés. Puis, j’ai écrit les équations bilan des concentrations et j’ai implémenté le modèle 0D en langage Python. Enfin, j’ai réalisé des tests de sensibilité pour différents scénarios environnementaux.

### 3.2.1. Mécanisme chimique

Le mécanisme chimique complet de formation de l’ozone troposphérique est complexe car il fait intervenir de nombreuses espèces chimiques qui réagissent entre elles sous l’effet du rayonnement solaire. Pour résumer, l’ozone ( $O_3$ ) est produit lors de l’oxydation du monoxyde de carbone (CO) et des COVs (Composés Organiques Volatiles), par catalyse des radicaux hydroxyles (HOx), en présence de radicaux nitrates (NOx). Les composés carbonylés produits (R’CHO) peuvent alors de nouveau réagir avec des radicaux hydroxyles (HOx) pour produire de l’ozone, ou créer par

	Réaction	Taux de réaction
1	$\text{RH} + \text{OH} \longrightarrow \text{HO}_2$	$2.0\text{e}^{-11}$
2	$\text{HO}_2 + \text{NO} \longrightarrow \text{OH} + \text{NO}_2$	$8.3\text{e}^{-12}$
3	$\text{NO}_2 + \text{OH} \longrightarrow \text{HNO}_3$	$1.4\text{e}^{-11}$
4	$\text{NO} + \text{O}_3 \longrightarrow \text{NO}_2$	$1.8\text{e}^{-14}$
5	$\text{NO}_2 + h\nu \longrightarrow \text{NO} + \text{O}_3$	$5.0\text{e}^{-3}$
6	$\text{O}_3 + h\nu \longrightarrow 2 \text{OH}$	$6.0\text{e}^{-6}$
7	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{H}_2\text{O}_2$	$5.8\text{e}^{-12}$

**Table 3.1.** – Réactions chimiques prises en compte dans le modèle 0D et taux de réaction associés. Si la réaction ne dépend pas de l'intensité de la lumière, le taux de réaction est exprimé en  $\text{cm}^3 \text{molécule}^{-1} \text{s}^{-1}$  (réactions 1 à 4 et 7). Sinon, le taux de réaction correspond à une fréquence de photolyse et est exprimé en  $\text{s}^{-1}$  (réactions 5 et 6). Les fréquences de photolyse correspondent aux fréquences maximales sur un cycle diurne. (Jacob, 1999 ; M1SGE-Web)

photolyse de nouveaux radicaux hydroxyles (HOx).

Dans ce modèle 0D, la chimie de l'ozone est représentée de façon simplifiée à l'aide d'un mécanisme chimique comprenant 7 espèces et 6 réactions (figure 2.2). Ce mécanisme néglige l'oxydation du monoxyde de carbone (CO), et donc la formation d'ozone qui en résulte. Concernant les radicaux hydroxyles (HOx), ils se limitent aux radicaux OH et HO<sub>2</sub>, et on néglige donc les réactions liées aux radicaux H, RO et RO<sub>2</sub>. Les R'CHO étant normalement produits lors de la réaction du RO<sub>2</sub> avec le NO, il n'y a donc pas formation de R'CHO, et, par conséquent, il n'y a donc pas non plus de formation d'ozone liée aux réactions des R'CHO avec OH, ni de création de nouveaux radicaux HOx normalement issus de la photolyse des R'CHO.

Le tableau 3.1 liste les réactions de ce mécanisme chimique.

Dans le tableau 3.1, à chaque réaction est associé un *taux de réaction*, qui représente la vitesse à laquelle les réactifs sont transformés en produits.

Le taux de réaction a une signification différente selon que la réaction dépend ou non de l'intensité de la lumière.

Si la réaction ne dépend pas de l'intensité de la lumière (réactions 1 à 4 et 7 du

tableau 3.1), alors cette réaction peut s'écrire :



Le taux de réaction  $k$  s'exprime alors en  $\text{cm}^3 \text{molécule}^{-1} \text{s}^{-1}$  et est tel que :

$$\frac{d}{dt} [X] = -k [X] [Y] \quad (3.2)$$

où les concentrations  $[X]$  et  $[Y]$  sont exprimées en molécules  $\text{cm}^{-3}$  (*densité en nombre*).

Si la réaction dépend de l'intensité de la lumière (réactions 5 et 6), alors il s'agit d'une réaction de photolyse.

Ce type de réaction s'écrit par exemple :



où  $X$  est le réactif et  $Y$  et  $Z$  les produits de la réaction,  $h$  est la constante de Planck, et  $\nu$  est la fréquence (ou taux) de photolyse.

Le taux de réaction est alors égal à la fréquence de photolyse, et est exprimé en  $\text{s}^{-1}$ . Ce taux est tel que :

$$-\frac{d}{dt} [X] = \frac{d}{dt} [Y] = \frac{d}{dt} [Z] = k [X] \quad (3.4)$$

avec  $[X]$ ,  $[Y]$  et  $[Z]$  les concentrations du réactif et des produits de la réaction (en molécule  $\text{cm}^{-3}$ ).

Dans le tableau 3.1, les fréquences de photolyse correspondent aux fréquences maximales sur un cycle diurne.

### 3.2.2. Paramétrisations

Cette section présente les paramétrisations décrivant l'évolution temporelle de la couche de mélange, des fréquences de photolyses, du dépôt sec et des émissions.

### 3.2.2.1. Épaisseur de la couche de mélange et dilution

Au coucher du soleil, la surface du sol se refroidit, créant des conditions stables près de la surface. La remontée de l'air froid présent à la surface est alors ralentie par cette stabilité. S'il y a peu de vent, la température s'inverse près de la surface. S'il y a beaucoup de vent, l'air de surface froid remonte par turbulence et les conditions modérément stables s'étendent sur une certaine épaisseur dans l'atmosphère. Après le lever du soleil, le réchauffement de la surface diminue l'épaisseur de la couche stable de l'atmosphère, jusqu'à ce que le profil instable de journée soit rétabli.

La couche instable en contact direct avec la surface s'appelle la couche de mélange. Cette couche de mélange ne dépasse généralement pas 3 km, même l'après-midi, à cause du plafonnement par les couches d'inversion formées par *subsidence*.

Pour simplifier, dans notre modèle 0D l'épaisseur de la couche de mélange,  $\bar{h}$ , sera choisie égale à 150 m entre 22 h et 6 h 30, à 1000 m entre 13 h et 19 h, et sera interpolée linéairement entre ces deux périodes.

Le domaine de l'espace décrit par notre modèle 0D peut donc être considéré comme une maille d'épaisseur  $\bar{h}$ . Les concentrations étant supposées homogènes dans la maille, notre modèle est bien un modèle 0D (il n'y a pas de gradient de concentration suivant les dimensions spatiales au cours d'un même pas de temps). Lorsqu'un modèle suit l'évolution chimique d'une colonne s'étendant verticalement depuis la surface jusqu'à une certaine épaisseur de mélange  $\bar{h}$ , on dit qu'il s'agit d'un modèle « colonne ». Si la colonne est mélangée de façon homogène, il s'agit alors d'un modèle 0D « colonne ».

A partir de ces épaisseurs, on calcule le gradient de l'épaisseur de la couche de mélange :

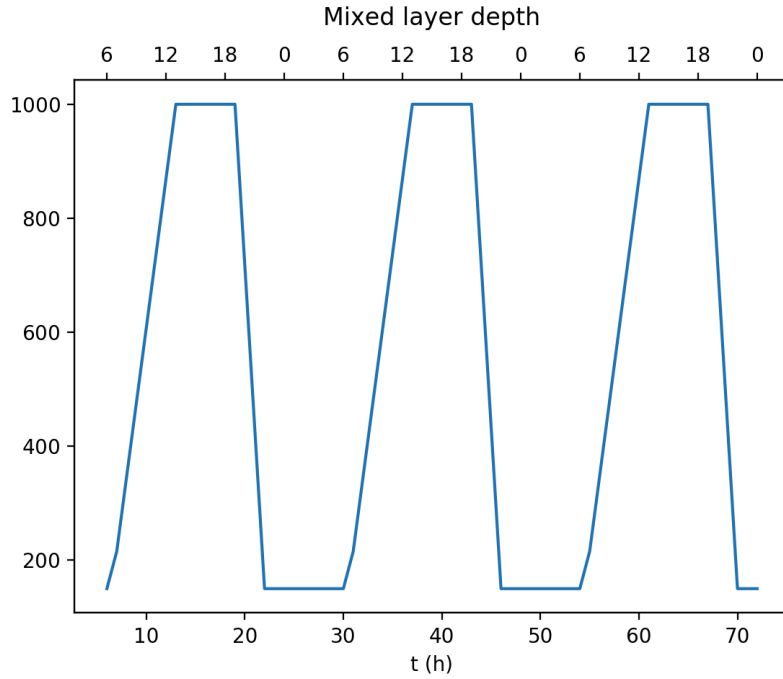
$$G_{[t_i, t_j]} = \frac{\bar{h}_{t_j} - \bar{h}_{t_i}}{t_j - t_i} \quad (3.5)$$

avec  $G_{[t_i, t_j]}$  le gradient dans l'intervalle  $[t_i, t_j]$  (en  $\text{m h}^{-1}$ ), et  $\bar{h}_{t_i}$  et  $\bar{h}_{t_j}$  les épaisseurs de mélange (en m) aux temps  $t_i$  et  $t_j$  (en h).

Le gradient de l'épaisseur de la couche de mélange nous permet ensuite d'interpoler l'épaisseur de la couche de mélange pour tout temps  $t$  de la journée :

$$\bar{h}(t) = G_{[t_i, t_j]} (t - t_i) + \bar{h}_{t_i}, \quad t \in [t_i, t_j] \quad (3.6)$$





**Figure 3.2.** – Évolution temporelle de l'épaisseur de la couche de mélange (en m). L'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

avec  $\bar{h}(t)$  en  $m$ .

La figure 3.2 présente l'évolution temporelle de l'épaisseur de la couche de mélange obtenue à partir de cette paramétrisation.

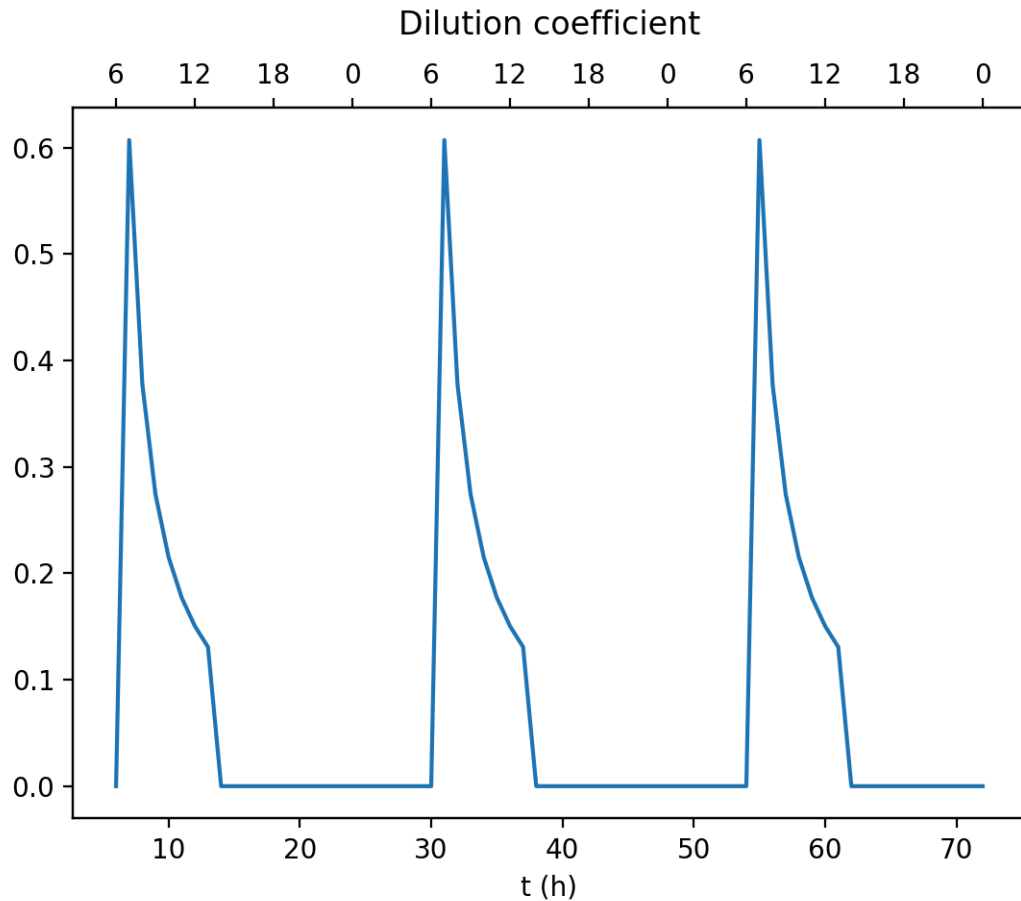
L'épaisseur de la couche de mélange varie au cours du temps. Cela permet de simuler la dilution des espèces chimiques dans l'air ambiant.

L'air à la surface redevient progressivement instable lorsque le soleil se lève et réchauffe la surface. C'est donc à ce moment là que le processus de dilution est le plus visible (Jacob, 1999).

J'ai donc choisi de paramétrer le processus de dilution dans la couche de mélange de sorte que la dilution ait lieu uniquement le matin, entre 6 h30 et 13 h. Pendant cette période, le coefficient de dilution  $k_{\text{dilution}}(t)$  (en  $h^{-1}$ ) est calculé comme :

$$k_{\text{dilution}}(t) = \begin{cases} \frac{G_{[6\text{ h}30,13\text{ h}]}}{\bar{h}(t)} & \text{si } t \in [6\text{ h}30, 13\text{ h}], \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.7)$$

avec  $G_{[6\text{ h}30,13\text{ h}]}$  le gradient de l'épaisseur de la couche de mélange dans l'intervalle



**Figure 3.3.** – Évolution temporelle du coefficient de dilution dans la couche de mélange (en  $\text{h}^{-1}$ ). L'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

$[6 \text{ h}30, 13 \text{ h}]$ , et  $\bar{h}(t)$  l'épaisseur de la couche de mélange.

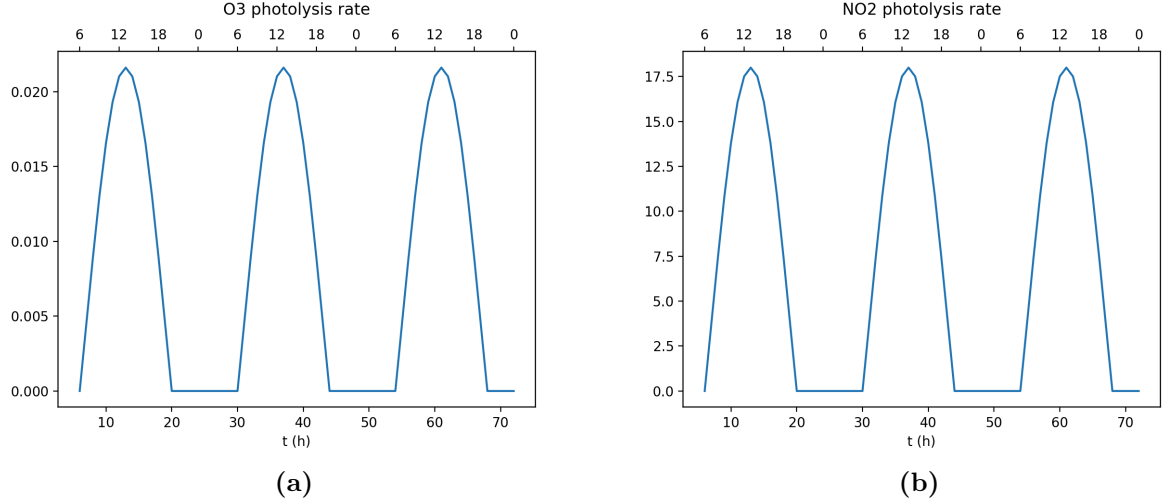
Le coefficient de dilution est nul en dehors de l'intervalle  $[6 \text{ h}30, 13 \text{ h}]$ .

La figure 3.3 présente l'évolution temporelle du coefficient de dilution obtenue à partir de cette paramétrisation.

### 3.2.2.2. Fréquences de photolyse de l'ozone et du dioxyde d'azote

Dans notre modèle 0D, l'ozone ( $\text{O}_3$ ) et le dioxyde d'azote ( $\text{NO}_2$ ) peuvent réagir par photolyse sous l'effet de la lumière du soleil.

Pour représenter le cycle diurne des fréquences de photolyse, j'ai donc utilisé la



**Figure 3.4.** – Évolution temporelle des fréquences de photolyse (en  $\text{h}^{-1}$ ) de l’ozone ( $\text{O}_3$ ) (3.4a) et du dioxyde d’azote ( $\text{NO}_2$ ) (3.4b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

paramétrisation sinusoïdale suivante :

$$J_{\{\text{O}_3, \text{NO}_2\}}(t) = \begin{cases} \frac{k_{\{6,5\}}}{1 + \sin\left(\frac{\pi}{12}\right)} \left( \sin\left(\frac{\pi}{12}\right) - \cos\left(\frac{(t-1)\pi}{12}\right) \right) & \text{si } t \in [6 \text{ h}, 20 \text{ h}], \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.8)$$

avec  $J_{\{\text{O}_3, \text{NO}_2\}}(t)$  la fréquence de photolyse de l’ozone ou du dioxyde d’azote (en  $\text{h}^{-1}$ ),  $k_{\{6,5\}}$  les fréquences maximales de photolyse de l’ozone ou du dioxyde d’azote sur un cycle diurne (en  $\text{h}^{-1}$ ) (voir tableau 3.1), et  $t$  le temps (en h).

La figure 3.4 présente l’évolution temporelle des fréquences de photolyse de l’ozone ( $\text{O}_3$ ) et du dioxyde d’azote ( $\text{NO}_2$ ) calculées à partir de cette paramétrisation.

### 3.2.2.3. Dépôts secs

Le dépôt sec d’une espèce gazeuse  $i$  donnée est paramétré comme un flux descendant ( $F$ ,  $\text{molécules cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ) :

$$F_i = -v_{d,i} C_i \quad (3.9)$$

sortant de la couche la plus basse du modèle, avec  $C$  (*molécules*  $\text{cm}^{-3}$ ) la concentration de l'espèce  $i$  à une hauteur de référence au-dessus de la surface, et  $v_d$  ( $\text{cm s}^{-1}$ ) la vitesse de dépôt sec.

Selon Wesely (1989), la vitesse de dépôt est décrite par analogie avec un système de résistances électriques. Le transport de matières vers la surface est ainsi modélisé par trois résistances en séries : la résistance aérodynamique ( $R_a$ , la même pour tous les gaz), la résistance de surface quasi-laminaire ( $R_{b,i}$ ), et la résistance de surface ( $R_{c,i}$ ). La résistance totale ( $R_{t,i}$ , en  $\text{s cm}^{-1}$ ) du dépôt de l'espèce gazeuse  $i$  est donc la somme de ces trois résistances, et est, par définition, l'inverse de la vitesse de dépôt :

$$v_{d,i} = \frac{1}{R_{t,i}} = \frac{1}{R_a + R_{b,i} + R_{c,i}} \quad (3.10)$$

Ces résistances dépendent respectivement de la diffusion turbulente dans la couche de surface, de la diffusion moléculaire, et de la solubilité de l'espèce chimique dans la couche laminaire.

Dans notre modèle 0D, on supposera pour simplifier les vitesses de dépôt de l'ozone ( $\text{O}_3$ ) et du dioxyde d'azote ( $\text{NO}_2$ ) constantes et respectivement égales à  $v_{d,\text{O}_3} = 0.5 \text{ cm s}^{-1}$  et  $v_{d,\text{NO}_2} = 0.1 \text{ cm s}^{-1}$ . Ces valeurs correspondent à des valeurs moyennes de la littérature (Jacob, 1999).

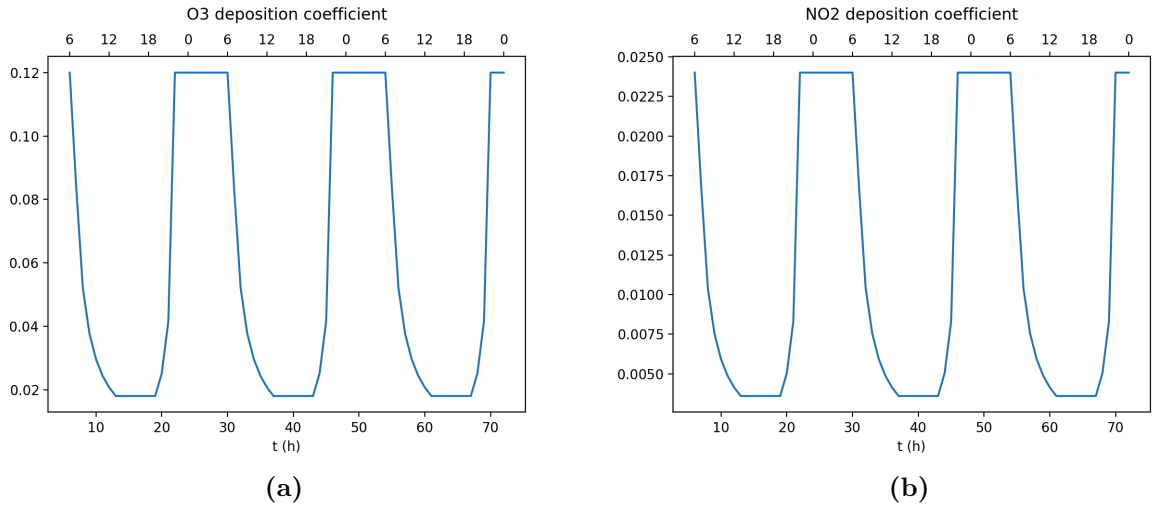
On calcule ensuite des coefficients de dépôt ( $k_{dep,\{\text{O}_3,\text{NO}_2\}}(t)$ , en  $\text{h}^{-1}$ ) en divisant la vitesse de dépôt par l'épaisseur de la couche de mélange  $\bar{h}(t)$  (en m) :

$$k_{dep,\{\text{O}_3,\text{NO}_2\}}(t) = \frac{v_{d,\{\text{O}_3,\text{NO}_2\}}}{\bar{h}(t)} \quad (3.11)$$

La figure 3.5 présente l'évolution temporelle des coefficients de dépôt de l'ozone ( $\text{O}_3$ ) et du dioxyde d'azote ( $\text{NO}_2$ ) calculés à partir de cette paramétrisation.

### 3.2.2.4. Émissions

Les émissions naturelles et anthropiques sont des sources de polluants primaires, qui vont réagir à la lumière pour former des polluants secondaires. Lorsque l'espèce chimique formée est de l'ozone, on appelle ces polluants primaires des précurseurs de l'ozone. Les oxydes d'azote et les COV sont notamment des précurseurs de l'ozone



**Figure 3.5.** – Évolution temporelle des coefficients de dépôt (en  $\text{h}^{-1}$ ) de l’ozone ( $\text{O}_3$ ) (3.5a) et du dioxyde d’azote ( $\text{NO}_2$ ) (3.5b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

(Castell et Thiec, 2017).

Les émissions sont issues de processus de combustion (transports, feux), de volatilisation (engrais) ou mécaniques (resuspension liée au trafic). Elles sont difficiles à mesurer et à calculer car elles présentent une grande variabilité spatiale et temporelle. Le calcul des flux d’émission de COV biogéniques dépend notamment de l’espèce chimique considérée, de la température et de la lumière (Lathiere *et al.*, 2006).

L’objectif de ce modèle 0D est de décrire l’évolution des concentrations d’ozone en milieu urbain. Dans un tel milieu, les émissions sont essentiellement d’origine anthropique. Par conséquent, seules les émissions anthropiques sont prises en compte dans ce modèle 0D. Ces émissions anthropiques correspondent aux émissions d’oxydes d’azote ( $\text{NO}_x$ ), qui incluent les émissions de monoxyde d’azote ( $\text{NO}$ ) et de dioxyde d’azote ( $\text{NO}_2$ ), et aux émissions d’hydrocarbures, symbolisés par l’espèce  $\text{RH}$ . Dans ce modèle, les hydrocarbures correspondent donc COV d’origine anthropique.

Pour paramétrer les émissions dans le modèle 0D, on calculera d’abord la distribution temporelle des émissions, puis les émissions par unité de volume.

### Distribution temporelle des émissions

Les émissions suivent un cycle diurne avec deux pics correspondant au trafic routier maximum : le matin à 8 h, et l’après-midi à 17 h.

Pour paramétrer cette distribution temporelle, les émissions suivront donc dans

notre modèle 0D une loi de distribution gaussienne bimodale : un mode pour le matin et un pour l'après-midi. Les paramètres des gaussiennes pour ces deux modes sont décrits dans le tableau 3.2.

	Matin ( <i>am</i> )	Après-midi ( <i>pm</i> )
Espérance ( $\mu$ , en h)	8	17
Écart type ( $\sigma$ , en h)	3	3.5

**Table 3.2.** – Paramètres des gaussiennes décrivant la distribution temporelle des émissions, pour le matin et l'après-midi.

Les fonctions gaussiennes associées à ces paramètres s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 g_{\{am,pm\}}(t) = & \frac{1}{\sigma_{\{am,pm\}}\sqrt{2\pi}} \left( \exp\left(-\frac{(t - \mu_{\{am,pm\}})^2}{2\sigma_{\{am,pm\}}^2}\right) \right. \\
 & + \exp\left(-\frac{(t - (\mu_{\{am,pm\}} + 24))^2}{2\sigma_{\{am,pm\}}^2}\right) \\
 & \left. + \exp\left(-\frac{(t - (\mu_{\{am,pm\}} - 24))^2}{2\sigma_{\{am,pm\}}^2}\right) \right)
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

avec  $g_{\{am,pm\}}(t)$  en  $h^{-1}$ , et  $t \in [0, 23]$  en h.

En multipliant ces fonctions par la fraction d'émission du matin ( $fr_{am} = 0.45h$ ) ou de l'après-midi ( $fr_{pm} = 0.55h$ ), on obtient la distribution temporelle des émissions du matin ( $EmiFrac_{am}(t)$ ) ou l'après-midi ( $EmiFrac_{pm}(t)$ ) :

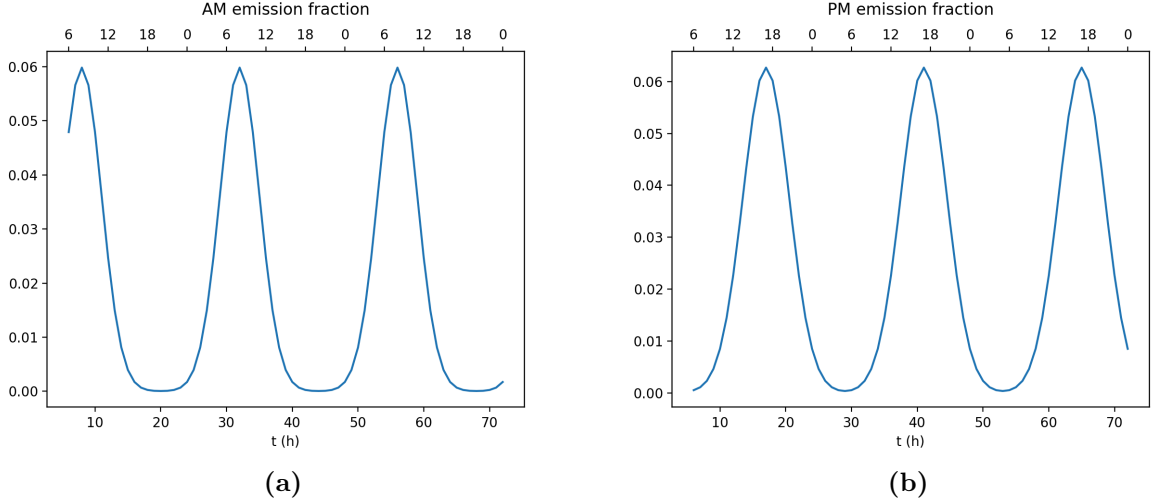
$$EmiFrac_{\{am,pm\}}(t) = fr_{\{am,pm\}} \frac{g_{\{am,pm\}}(t)}{\sigma_{\{am,pm\}}\sqrt{2\pi}} \tag{3.13}$$

où  $EmiFrac_{\{am,pm\}}(t)$  est sans dimension.

La figure 3.6 présente l'évolution temporelle des fractions d'émission calculées à partir de cette paramétrisation.

### Émissions d'oxydes d'azote et de composés organiques volatiles

On paramètre ensuite les flux d'émissions surfaciques ( $EmiSurf_{\{NO_x, RH\}}(t)$ , en molécules  $cm^{-2}h^{-1}$ ) à partir des flux d'émission surfaciques journaliers moyens de



**Figure 3.6.** – Évolution temporelle des fractions d’émission (sans dimension) du matin (3.6a) et de l’après-midi (3.6b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

NO<sub>x</sub> et de RH ( $\Phi_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}$ , en molécules  $\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ), et de la distribution temporelle des émissions ( $EmiFrac_{\{am, pm\}}(t)$ ) :

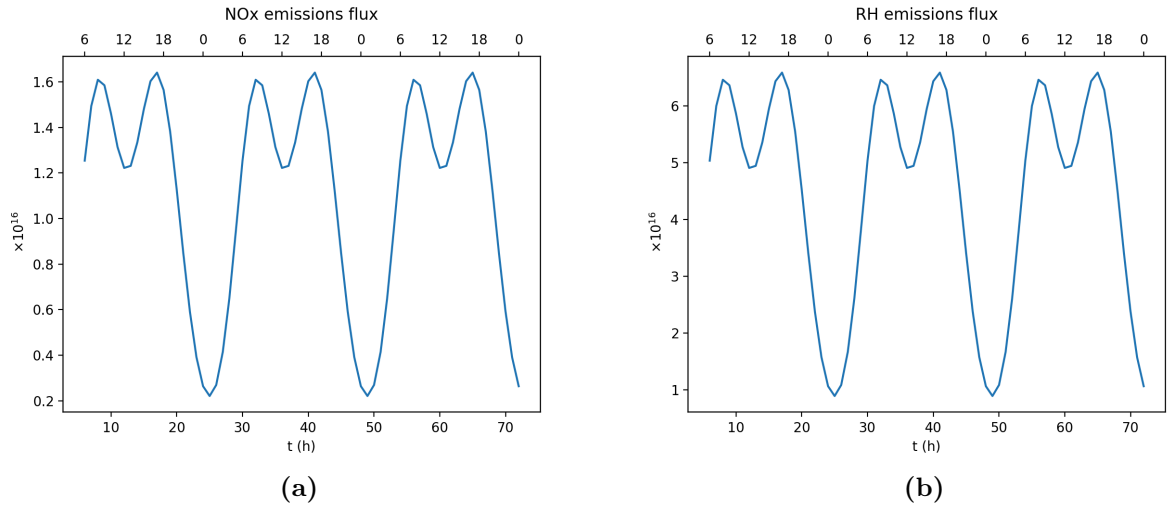
$$EmiSurf_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}(t) = (EmiFrac_{am}(t) + EmiFrac_{pm}(t)) \Phi_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}} \quad (3.14)$$

Les flux  $\Phi_{\text{NO}_x}$  et  $\Phi_{\text{RH}}$  sont supposés constants et égaux à  $\Phi_{\text{NO}_x} = 2.59\text{e}^{17}$  molécules  $\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$  et  $\Phi_{\text{RH}} = 1.04\text{e}^{18}$  molécules  $\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ . Ces valeurs sont des valeurs moyennes issues de la littérature, et correspondent aux émissions en été dans un environnement de type urbain de l’hémisphère nord (Jacob, 1999).

La figure 3.7 présente l’évolution temporelle des flux d’émissions surfaciques calculés à partir de cette paramétrisation.

On calcule ensuite les flux d’émissions volumiques  $EmiVol_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}(t)$  (en molécules  $\text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$ ) en divisant les flux émissions surfaciques par l’épaisseur de la couche de mélange ( $\bar{h}(t)$ ) :

$$EmiVol_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}(t) = \frac{EmiSurf_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}(t)}{\bar{h}(t)} \quad (3.15)$$



**Figure 3.7.** – Évolution temporelle des flux d’émissions surfaciques (en molécules  $\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ) de  $\text{NO}_x$  (3.7a) et de RH (3.7b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

### 3.2.3. Équations bilan des concentrations

#### 3.2.3.1. Espèces à l’équilibre quasi stationnaire

Pour ce modèle, j’ai fait l’hypothèse que les espèces radicalaires  $\text{HO}_2$  et  $\text{OH}$  étaient à l’équilibre quasi stationnaire (*EQS*), c’est à dire que leur taux de réaction et leur *durée de vie* varient, mais à des échelles de temps bien supérieures à leur durée de vie. Autrement dit, le taux de perte d’une espèce à l’EQS est limité par son taux de production, de sorte que son taux de perte reste à peu près égal à son taux de production au cours du temps. Dans un modèle 0D, la durée de vie correspond au temps moyen pendant lequel une molécule reste dans la boîte.

Cette hypothèse permet de simplifier considérablement le système d’équations à résoudre, en réduisant les équations différentielles (régissant l’évolution des concentrations des espèces à l’EQS) à des équations algébriques.

Ainsi, les concentrations des radicaux  $\text{HO}_2$  et  $\text{OH}$  vérifient le système d’équations



suivant :

$$\begin{cases} a = 2k_7 \\ b = \frac{k_3[\text{NO}_2]k_2[\text{NO}]}{k_1[\text{RH}] + k_3[\text{NO}_2]} \\ c = -\frac{2J_{\text{O}_3}[\text{O}_3]k_1[\text{RH}]}{k_1[\text{RH}] + k_3[\text{NO}_2]} \\ \Delta = b^2 - 4ac \\ [\text{HO}_2]_{\text{EQS}} = \frac{-b + \sqrt{\Delta}}{2a} \\ [\text{OH}]_{\text{EQS}} = \frac{2J_{\text{O}_3}[\text{O}_3] + k_2[\text{HO}_2]_{\text{EQS}}[\text{NO}]}{k_1[\text{RH}] + k_3[\text{NO}_2]} \end{cases} \quad (3.16)$$

avec

- [...] les concentrations des espèces chimiques qui ne sont pas à l'EQS (en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ),
- [...]\_{\text{EQS}} les concentrations des espèces chimiques à l'EQS (en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ),
- $k_{i\dots j}$  les taux des réactions chimiques  $i\dots j$  (en  $\text{cm}^3 \text{molécule}^{-1} \text{h}^{-1}$ ) (voir tableau 3.1),
- $J_{\text{O}_3}$  la fréquence de photolyse de l'ozone (en  $\text{h}^{-1}$ ) (voir section 3.2.2.2, équation 3.8),
- et  $a$ ,  $b$  et  $c$  les coefficients de l'équation du second degré reflétant l'état quasi-stationnaire et  $\Delta$  son discriminant.

### 3.2.3.2. Autres espèces

Les espèces  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{RH}$  et  $\text{HNO}_3$  ne sont pas à l'EQS.

Pour chacune de ces espèces, l'équation bilan s'écrit :

$$\frac{dC_i}{dt} = P_i - L_i C_i \quad (3.17)$$

avec

- $C_i$  la concentration de l'espèce  $i$  considérée (en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ),
- $P_i$  le terme représentant les sources de  $i$  ( $P$  pour *Products*) (en molécules  $\text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$ ),
- et  $L_i$  le terme représentant les puits de  $i$  ( $L$  pour *Losses*) (en  $\text{h}^{-1}$ ).

Dans ces équations bilan, on multiplie le terme puits  $L_i$  par la concentration  $C_i$  pour assurer la conservation de la masse : on ne peut perdre (au temps  $t$ ) plus de l'espèce  $i$  que ce qu'en contient notre boîte (au temps  $t$ ).

Au vu des processus modélisés dans notre modèle, les termes sources et puits pour ces espèces chimiques s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{O_3} = [O_3]_{\text{ext}} (k_{\text{dilution}} + t_r) + J_{NO_2} [NO_2] \\ L_{O_3} = k_{\text{dep},O_3} + k_{\text{dilution}} + k_4 [NO] J_{O_3} + t_r \\ \\ P_{NO} = EmiVol_{NOx} \left[ \frac{[NO]}{[NOx]} \right]_0 + J_{NO_2} [NO_2] + t_r [NO]_{\text{ext}} \\ L_{NO} = k_2 [HO_2]_{EQS} + k_4 [O_3] + k_{\text{dilution}} + t_r \\ \\ P_{NO_2} = EmiVol_{NOx} \left[ \frac{[NO_2]}{[NOx]} \right]_0 + k_4 [NO] [O_3] + k_2 [NO] [HO_2]_{EQS} + t_r [NO_2]_{\text{ext}} \\ L_{NO_2} = k_{\text{dep},NO_2} + J_{NO_2} + k_3 [OH]_{EQS} + k_{\text{dilution}} + t_r \\ \\ P_{RH} = EmiVol_{RH} + t_r [RH]_{\text{ext}} \\ L_{RH} = k_1 [OH]_{EQS} + k_{\text{dilution}} + t_r \\ \\ P_{HNO_3} = k_3 [OH]_{EQS} [NO_2] \\ L_{HNO_3} = k_{\text{dilution}} + t_r \\ \\ P_{H_2O_2} = k_7 [HO_2]_{EQS}^2 \\ L_{H_2O_2} = k_{\text{dilution}} + t_r \end{array} \right. \quad (3.18)$$

avec

- $[\dots]_0$  et  $[\dots]_{\text{ext}}$  les concentrations initiales et aux limites (en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ) (voir tableau 3.3),
- $[\dots]_{EQS}$  les concentrations des espèces chimiques à l'EQS (en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ) (voir section 3.2.3.1, équation 3.16),
- $k_{i\dots j}$  les taux des réactions chimiques  $i\dots j$  (en  $\text{cm}^3 \text{molécule}^{-1} \text{h}^{-1}$ ) (voir ta-

Espèce chimique	Concentration initiale	Concentration aux limites
O <sub>3</sub>	40	40
NO	5	0.025
NO <sub>2</sub>	10	0.25
RH	15	15
HNO <sub>3</sub>	0	0
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0	0

**Table 3.3.** – Concentrations initiales et aux limites (en ppb) des espèces chimiques qui ne sont pas à l’EQS. D’après Jacob (1999) et M1SGE-Web.

bleau 3.1),

- $t_r$  le *taux de renouvellement* (en h<sup>-1</sup>). Le taux de renouvellement est l’inverse du *temps de résidence*  $\tau$ . Ici,  $\tau$  est constant et vaut 6 h (Jacob, 1999). Donc  $t_r = 0.17 \text{ h}^{-1}$ .
- $\left[\frac{[\text{NO}_2]}{[\text{NOx}]}\right]_0$  et  $\left[\frac{[\text{NO}]}{[\text{NOx}]}\right]_0$  les fractions des émissions de NOx provenant respectivement des émissions de NO<sub>2</sub> et des émissions de NO ; dans ce modèle, ces fractions sont constantes et valent respectivement 0.1 et 0.9 (sans unité) (Jacob, 1999),
- et  $k_{\text{dilution}}$ ,  $J_{\text{O}_3}$ ,  $J_{\text{NO}_2}$ ,  $k_{\text{dep},\text{O}_3}$ ,  $k_{\text{dep},\text{NO}_2}$ ,  $EmiVol_{\text{NOx}}$  et  $EmiVol_{\text{RH}}$  les paramétrisations définies à la section 3.2.2.

Les concentrations initiales et aux limites de ces espèces chimiques sont rassemblées dans le tableau 3.3. Ces valeurs correspondent à des valeurs moyennes dans un environnement de type urbain et en été (Jacob, 1999).

Les concentrations du tableau 3.3 sont exprimées en ppb (parties par milliard). Cette unité représente le rapport de mélange, c’est-à-dire le nombre de moles du gaz considéré par rapport au nombre de moles d’air. Le rapport de mélange est sans dimension, et est invariant quelle que soit la densité de l’air. Les ppb sont souvent utilisés pour quantifier les concentrations très faibles des polluants tel que l’ozone.

Pour convertir des ppb en molécules cm<sup>-3</sup>, il suffit de multiplier la concentration (en ppb) par la densité de l’air ( $\rho_{\text{air}}$ , en *molécules cm<sup>-3</sup>*), puis de diviser le résultat

obtenu par  $10^9$  :

$$C_{\text{molécules cm}^{-3}} = C_{ppb} \times \frac{\rho_{\text{air}}}{10^9} \quad (3.19)$$

Pour ce modèle, on utilisera une densité de l'air égale à  $2.5e^{19}$  molécules  $\text{cm}^{-3}$ , qui correspond à la densité de l'air moyenne au niveau de la mer et à  $T \simeq 20^\circ\text{C}$  (Jacob, 1999).

Les conditions aux limites sont constantes, ce qui signifie que les flux des différentes espèces entrant et sortant de la boîte restent constants.

### 3.2.4. Implémentation

Pour pouvoir simuler numériquement la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface, j'ai ensuite implémenté ce modèle 0D en langage Python. J'ai choisi ce langage car il permet de programmer rapidement ce type modèle. De plus, il permet d'obtenir un code lisible multiplateformes et donc facilement réutilisable. Enfin, Python met à disposition un ensemble de bibliothèques scientifiques de qualité. (Kuhlman, 2013)

A partir d'un ensemble de paramètres (vitesses de dépôt, flux d'émissions, conditions initiales et aux limites, constantes de réaction, etc.), le modèle 0D calcule à chaque pas de temps les concentrations des différentes espèces chimiques modélisées ( $\text{HO}_2$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{O}_3$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{RH}$  et  $\text{HNO}_3$ ).

Les paramètres du modèle sont lus à partir de fichiers CSV (Comma Separated Value). Les temps de début et de fin ainsi que le pas de temps de simulation sont à renseigner dans le code.

Le système d'équations différentielles (équations 3.17 et 3.18) est intégré numériquement à l'aide du solveur LSODA de la bibliothèque Fortran ODEPACK (Hindmarsh, 1983), via l'interface proposée par la bibliothèque Python SciPy (Jones *et al.*, 2014). LSODA est un solveur d'équations différentielles ordinaires adapté à la résolution de systèmes raides et non-raides. Il choisit automatiquement entre un schéma prédicteur-correcteur d'Adams (adapté aux systèmes non-raides) et un schéma de type « Backward Differentiation Formula » (BDF) (adapté aux systèmes raides).

A la fin de la simulation, les concentrations calculées sont écrites dans un fichier CSV. Ce fichier inclut également les valeurs des paramètres, afin d'assurer la traçabilité des simulations. Des graphes représentant l'évolution temporelle des variables

paramétrées et intégrées sont également générés et enregistrés au format PNG (Portable Network Graphics).

L'externalisation dans des fichiers CSV des paramètres de simulation permet de réaliser de façon automatisée des tests de sensibilité pour différents scénarios environnementaux. De plus, la définition des équations étant séparée dans le code de l'appel au solveur SciPy, ce modèle permet de tester facilement différents schémas d'intégration numériques. Le modèle exploite ainsi au maximum les capacités d'*interopérabilité* et de *généricité* offertes par le langage Python.

Le code du modèle est téléchargeable sur Dropbox (?).

### 3.3. Résultats

J'ai d'abord calculé les concentrations à partir de valeurs de paramètres correspondant à des conditions normales de températures et d'émissions dans un environnement de type urbain de l'hémisphère nord pendant les mois d'été (simulation de référence).

J'ai ensuite testé la sensibilité du modèle en appliquant des facteurs de perturbation aux valeurs de référence. Ces perturbations correspondent à des scénarios de canicule et d'émissions.

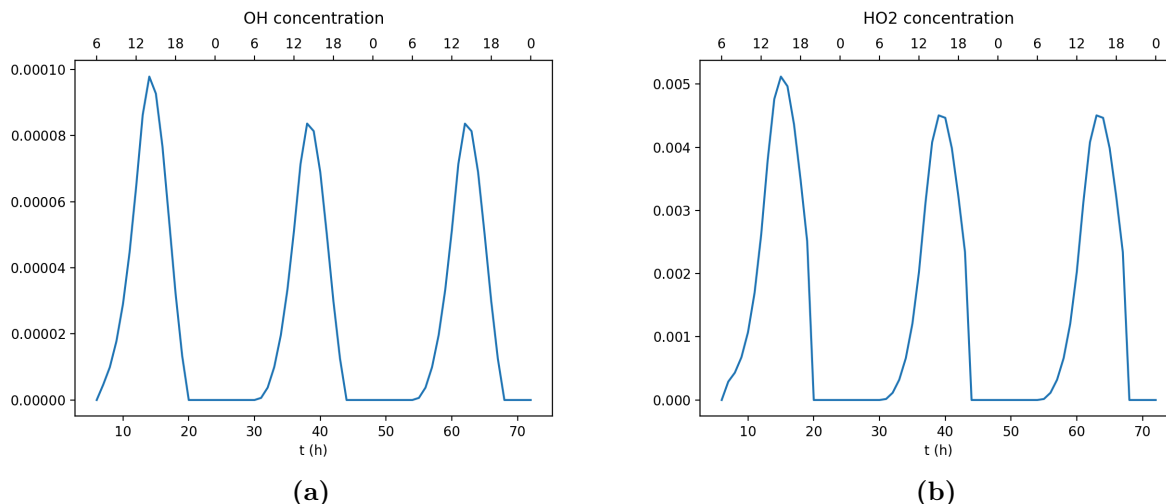
Les valeurs des paramètres, les facteurs de perturbation ainsi que les conditions initiales et aux limites utilisés (tableau 3.3) sont issus du TP du Master M1SGE-Web et du livre de Jacob (1999).

Les résultats présentés dans cette section ainsi que les graphes des paramétrisations et des concentrations des autres espèces chimiques modélisées sont disponibles sur Dropbox (?).

#### 3.3.1. Conditions normales

Les valeurs des paramètres utilisées pour la simulation de référence sont :

- épaisseur de la couche de mélange (en m) :  $\bar{h}_{[13\text{h},19\text{h}]} = 1000$  et  $\bar{h}_{[22\text{h},6\text{h}30]} = 150$  (interpolation linéaire entre les deux intervalles),
- temps de résidence (en h) :  $\tau = 6$  ,
- fréquences de photolyse (en  $\text{s}^{-1}$ ) :  $\nu_{\text{NO}_2} = k_5 = 5.0\text{e}^{-3}$  et  $\nu_{\text{O}_3} = k_6 = 6.0\text{e}^{-6}$ ,
- vitesses de dépôt (en  $\text{cm s}^{-1}$ ) :  $v_{d,\text{O}_3} = 0.5$  et  $v_{d,\text{NO}_2} = 0.1$  ,
- flux d'émissions (en molécules  $\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ) :  $\Phi_{\text{NO}_x} = 2.59\text{e}^{17}$  et  $\Phi_{\text{RH}} = 1.04\text{e}^{18}$ .



**Figure 3.8.** – Évolution temporelle des concentrations (en ppb) de OH (3.8a) et de HO<sub>2</sub> (3.8b). L'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu.

Les figures 3.8a, 3.8b, 3.9a, 3.10a et 3.11a représentent respectivement les évolutions temporelles des concentrations des radicaux hydroxyles (OH et HO<sub>2</sub>), d'ozone (O<sub>3</sub>), de dioxyde d'azote (NO<sub>2</sub>) et de monoxyde d'azote (NO), calculées à partir de ces paramètres.

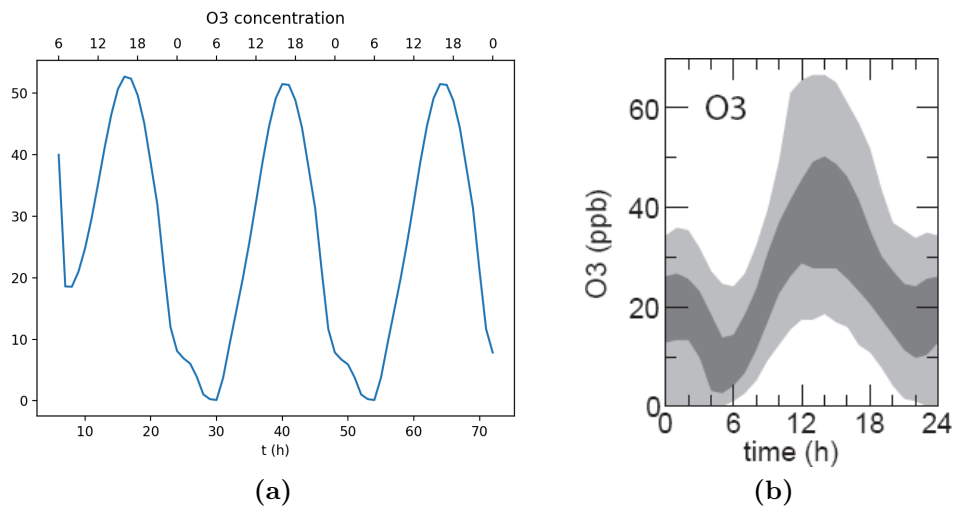
On observe d'abord que le système se met en quelques heures à l'équilibre, et que les concentrations suivent alors un cycle de période 24 h.

Les concentrations des radicaux hydroxyles (figures 3.8a et 3.8b) sont nulles la nuit (entre 20 h et 6 h). En journée, ces concentrations augmentent progressivement jusqu'à atteindre leur maximum vers 13 h, puis diminuent progressivement jusqu'à redevenir nulles à 20 h. Ces maximums valent respectivement  $10^{-4}$  ppb pour le radical OH et  $5 \times 10^{-3}$  ppb pour le radical HO<sub>2</sub>.

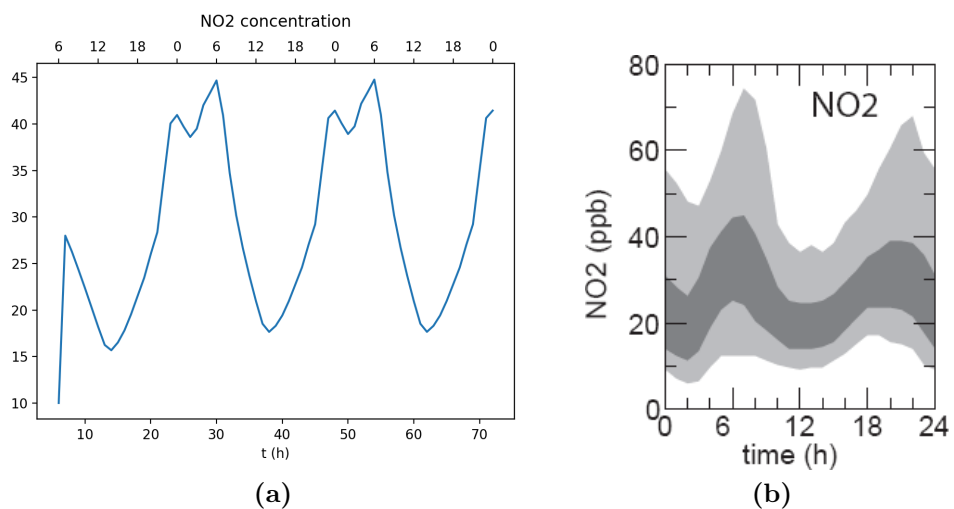
Concernant les concentrations d'O<sub>3</sub> (figure 3.9a), on observe qu'elles augmentent pendant la journée pour atteindre environ 50 ppb vers 16 h, puis diminuent la nuit jusqu'à devenir nulles à 6 h.

A l'inverse, les concentrations de NO<sub>2</sub> (figure 3.10a) diminuent le jour jusqu'à un minimum d'environ 17 ppb vers 14 h, puis augmentent jusqu'à atteindre un premier pic d'environ 42 ppb à minuit, et un second d'environ 45 ppb à 6 h.

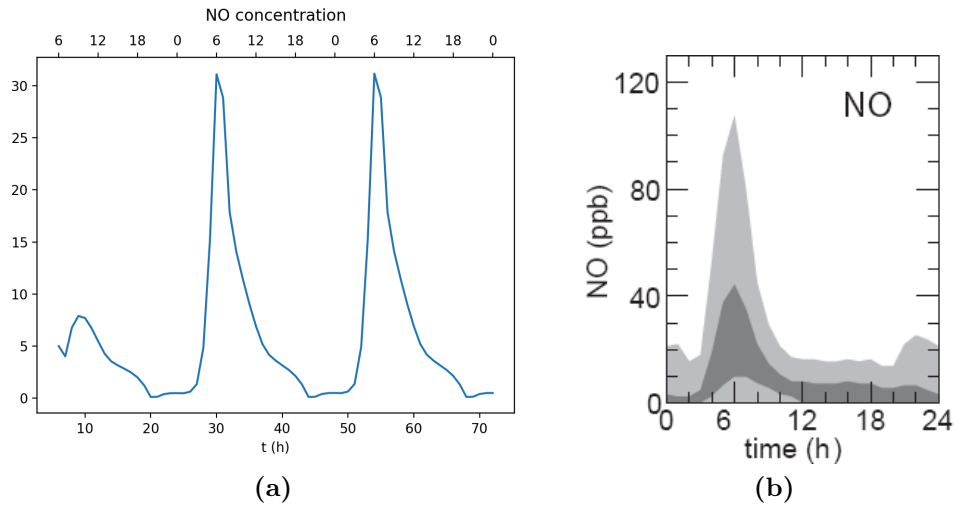
Enfin, les concentrations de NO (figure 3.11a) augmentent très fortement peu avant 6 h pour atteindre un maximum d'environ 32 ppb à 6 h, puis diminuent rapidement jusqu'à midi (5 ppb), et ensuite plus progressivement jusqu'à s'annuler peu



**Figure 3.9.** – Évolution temporelle des concentrations d'O<sub>3</sub> (en ppb) calculées (figure 3.9a) et mesurées (figure 3.9b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.9a, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.9b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées.



**Figure 3.10.** – Évolution temporelle des concentrations de NO<sub>2</sub> (en ppb) calculées (figure 3.10a) et mesurées (figure 3.10b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.10a, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.10b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées.



**Figure 3.11.** – Évolution temporelle des concentrations de NO (en ppb) calculées (figure 3.11a) et mesurées (figure 3.11b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.11a, l’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.11b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées.

avant 6 h.

Ces résultats seront discutés à la section suivante (section 3.4).

### 3.3.2. Scénario canicule

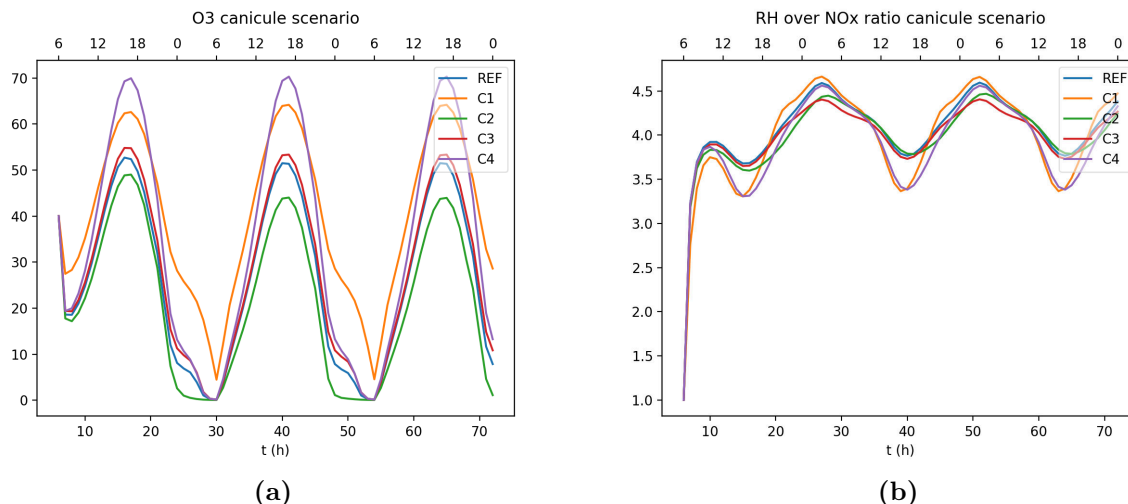
Les facteurs de perturbations appliqués aux paramètres de référence (voir section 3.3.1) pour tester la sensibilité du modèle à des conditions correspondant à un scénario canicule sont :

- C1 : épaisseur de la couche de mélange multipliée par deux ( $\bar{h} \times 2$ ),
- C2 : temps de résidence multiplié par deux ( $\tau \times 2$ ),
- C3 : vitesse de dépôt divisée par deux ( $v_d/2$ ),
- C4 : photolyses de l’ozone et du dioxyde d’azote multipliées par deux ( $J_{\{O_3, NO_2\}} \times 2$ ).

Les figures 3.12a et 3.12b représentent respectivement les concentrations d’ozone ( $O_3$ ) et les rapports entre les concentrations de RH et de NOx calculés pour chacune de ces perturbations.

Comme pour la simulation de référence (section 3.3.1), on observe que le système se met en quelques heures à l’équilibre, et que les concentrations d’ozone (figure 3.12a) et le rapport entre RH et NOx (3.12b) suivent alors un cycle de période 24 h.





**Figure 3.12.** – Évolution temporelle des concentrations d'O<sub>3</sub> (en ppb) (figure 3.12a) et du rapport entre les concentrations de RH et de NO<sub>x</sub> (figure 3.12b) en conditions normales (courbe REF), et pour différents scénarios de canicule (C1 :  $\bar{h} \times 2$ , C2 :  $\tau \times 2$ , C3 :  $v_a/2$ , C4 :  $J_{\{O_3, NO_2\}} \times 2$ ). Sur les deux figures, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas indique le temps absolu.

Concernant les concentrations d'ozone (figure 3.12a), on observe que les perturbations C1, C3 et C4 entraînent respectivement des augmentations d'environ 10, 2 et 20 ppb par rapport à la concentration de référence (courbe REF). À l'inverse, la perturbation C2 entraîne une diminution d'environ 10 ppb de cette concentration.

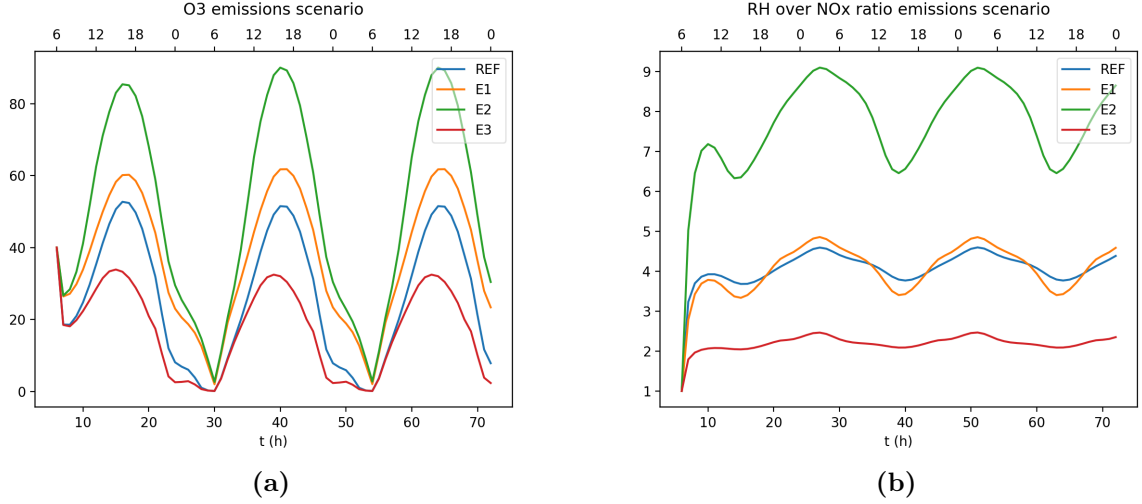
Le rapport entre les concentrations de RH et de NO<sub>x</sub> (3.12b) indique globalement, une fois le système à l'équilibre, un minimum d'environ 3.3 vers 15 h, et un maximum d'environ 4.7 vers 3 h. Les différentes perturbations entraînent assez peu de variation de l'amplitude du rapport (entre  $-0.3$  et  $+0.2$  par rapport à la courbe REF). Cette variation est un peu plus marquée pour les perturbations C1 et C4 ( $-1.0$  environ).

Ces résultats seront discutés à la section suivante (section 3.4).

### 3.3.3. Scénario d'émissions

Lors d'épisode de forte pollution à l'ozone, les pouvoirs publics mettent souvent en œuvre des mesures de contrôle des émissions de polluants primaires (baisse de la vitesse limite de circulation par exemple), pour réduire la pollution à l'ozone engendrée par ces polluants primaires.

Les perturbations suivantes permettent de tester l'impact de telles mesures sur les concentrations d'ozone :



**Figure 3.13.** – Évolution temporelle des concentrations d'O<sub>3</sub> (en ppb) (figure 3.13a) et du rapport entre les concentrations de RH et de NO<sub>x</sub> (figure 3.13b) en conditions normales (courbe REF), et pour différents scénarios d'émissions (E1 :  $\Phi_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}/2$ , E2 :  $\Phi_{\text{NO}_x}/2$ , E3 :  $\Phi_{\text{RH}}/2$ ). Sur les deux figures, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas indique le temps absolu.

- E1 : flux d'émissions des oxydes d'azote et des hydrocarbures divisés par deux ( $\Phi_{\{\text{NO}_x, \text{RH}\}}/2$ ),
- E2 : flux d'émissions des oxydes d'azote divisé par deux ( $\Phi_{\text{NO}_x}/2$ ),
- E3 : flux d'émissions des hydrocarbures divisé par deux ( $\Phi_{\text{RH}}/2$ ).

Les figures 3.13a et 3.13b représentent respectivement les concentrations d'ozone (O<sub>3</sub>) et les rapports entre les concentrations de RH et de NO<sub>x</sub> calculés pour chacune de ces perturbations.

Là encore, comme pour la simulation de référence (section 3.3.1) et le scénario caniculaire (section 3.3.2), on observe que le système se met en quelques heures à l'équilibre, et que les concentrations d'ozone et le rapport entre RH et NO<sub>x</sub> suivent alors un cycle de période 24 h.

Concernant les concentrations d'ozone (figure 3.13a), on observe que les perturbations E1 et E2 entraînent respectivement des augmentations d'environ 10 et 40 ppb par rapport à la concentration de référence (courbe REF). À l'inverse, la perturbation E3 entraîne une diminution d'environ 20 ppb de cette concentration.

On observe que les perturbations E2 et E3 impactent fortement le rapport entre les concentrations de RH et de NO<sub>x</sub> (3.13b), d'environ respectivement +5 pour E2 et -3 pour E3. La perturbation E1 a quant à elle un impact beaucoup plus limité (entre

-0.3 et +0.2). Enfin, l'amplitude du rapport est très variable selon la perturbation : 1.5 pour E1, 2.5 pour E2 et 0.2 pour E3.

Ces résultats seront discutés à la section suivante (section 3.4).

## 3.4. Discussion

Nous expliquerons d'abord les résultats obtenus avec la simulation de référence (section 3.3.1). Puis nous comparerons ces résultats aux évolutions diurnes moyennes d'O<sub>3</sub>, de NO<sub>2</sub> et de NO relevées à Paris (18eme Arrondissement) pour les mois d'été (figures 3.9b, 3.10b et 3.11b, M1SGE-Web).

Nous discuterons ensuite les résultats obtenus pour les différents tests de sensibilité réalisés aux sections 3.3.2 et 3.3.3.

### 3.4.1. Conditions normales

#### 3.4.1.1. Explication des résultats obtenus

Le système se met rapidement à l'équilibre. Cela signifie que l'équation de continuité est satisfaite : la variation de la concentration de chaque espèce chimique est bien égale à la différence entre ses sources et ses puits.

Les concentrations des radicaux hydroxyles OH (figure 3.8a) et HO<sub>2</sub> (figure 3.8b) sont nulles la nuit et augmentent le jour car ces radicaux sont formés par photolyse avec la lumière du soleil.

Le cycle de période 24 h observé correspond au cycle des radicaux (Jacob, 1999). Le jour, les hydrocarbures (RH) rejetés dans l'atmosphère sont oxydés par catalyse des radicaux hydroxyles (OH et HO<sub>2</sub>) en présence des radicaux nitrates (NO et NO<sub>2</sub>) émis le matin (notamment par le trafic automobile). La nuit, il n'y a pas de photolyse. Il n'y a donc pas de radicaux hydroxyles formés, et donc pas de formation d'ozone. L'ozone continue néanmoins à se déposer à la surface, et donc la concentration en ozone diminue.

Le cycle des radicaux explique également les variations d'O<sub>3</sub>, de NO et de NO<sub>2</sub> observées (figures 3.9a, 3.11a et 3.10a).

Le modèle suit donc bien les paramétrisations définies à la section 3.2.2.

### 3.4.1.2. Validation des résultats

En comparant qualitativement les figures 3.9a et 3.9b, 3.10a et 3.10b, et 3.11a et 3.11b deux à deux, on peut voir que les concentrations calculées, après les quelques heures nécessaires au système pour se mettre à l'équilibre, restent dans la zone définie par les percentiles 25 et 75, et sont donc relativement proches des concentrations mesurées.

Notre modèle décrit donc bien la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement de type urbain.

### 3.4.2. Scénario canicule

La figure 3.12 montre que le système reste à l'équilibre malgré l'application des facteurs de perturbation. Le solveur utilisé (voir section 3.2.4) est donc capable d'intégrer le système modélisé malgré ces perturbations.

La multiplication par deux de l'épaisseur de la couche de mélange (perturbation C1) augmente la concentration d'ozone d'environ 10 ppb car elle favorise le brassage et donc la réaction des polluants primaires impliqués dans la formation de l'ozone. De même, la division par deux de la vitesse de dépôt (perturbation C3) entraîne une augmentation de 2 ppb de la concentration d'ozone car elle diminue la quantité d'ozone qui se dépose au cours du temps. Enfin, la multiplication par deux des photolyses de l'ozone et du dioxyde d'azote (perturbation C4) augmente considérablement la concentration d'ozone (+20 ppb) car la réaction de photolyse du  $\text{NO}_2$  est beaucoup plus rapide ( $\sim 1000$  fois plus rapide) que celle de l' $\text{O}_3$  (voir taux des réactions 5 et 6 du tableau 3.1). Autrement dit, en un temps donné il y a beaucoup plus de molécules d' $\text{O}_3$  formées (par photolyse du  $\text{NO}_2$ ) que de molécules d' $\text{O}_3$  consommées (par photolyse de l' $\text{O}_3$ ).

A l'inverse, la multiplication par deux du temps de résidence (perturbation C2) entraîne une diminution d'environ 10 ppb de la concentration d'ozone. Cela signifie qu'en un temps donné, la quantité d'ozone consommée dans la boîte (lors des réactions photochimiques) est alors supérieure au flux d'ozone entrant. Le flux d'ozone entrant dépend des conditions aux limites de l'ozone ( $[\text{O}_3]_{\text{ext}}$ ) et du temps de résidence ( $\tau$ ) (voir équation 3.18 et tableau 3.3).

Enfin, les différentes perturbations impactent peu les rapports entre les concentrations de RH et de NOx car ces perturbations ne s'appliquent pas aux émissions de polluants et n'affectent donc pas directement les concentrations de RH et de NOx.

### 3.4.3. Scénario d'émissions

Comme pour le scénario canicule, la figure 3.13 montre que le système reste à l'équilibre malgré l'application des facteurs de perturbation. Le solveur utilisé est donc capable d'intégrer le système malgré ces perturbations.

La production d'ozone dépend directement de l'abondance relative des COV et des NOx. Notamment, en milieu urbain le régime chimique est dit « limité par les COV » : la production d'ozone augmente quand les COV sont plus abondants que les NOx, et diminue quand les NOx sont plus abondants que les COV. Ce régime chimique explique que l'impact des réductions d'émissions soit différent selon les émissions réduites.

On peut donc déduire de ces résultats qu'une mesure efficace pour réduire la pollution à l'ozone en milieu urbain consiste à réduire les émissions de COV. Par contre, une réduction des émissions de NOx uniquement, ou des émissions de NOx et de COV à part égale, entraîne une augmentation de la concentration d'ozone.

Enfin, contrairement au scénario canicule, les perturbations du scénario d'émissions impactent fortement les rapports entre les concentrations de RH et de NOx, car ces perturbations s'appliquent directement aux émissions de RH et de NOx.

## 3.5. Conclusion

Le modèle 0D développé permet de simuler correctement la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement de type urbain. De plus les tests de sensibilité ont montré que le modèle permet également de simuler ces concentrations lors de scénarios de canicule, et de tester l'efficacité de mesures de contrôle des émissions sur la pollution à l'ozone. Enfin, le solveur utilisé (LSODA) reste stable, et ce même en perturbant les paramètres du modèle.

Cependant, l'intérêt pratique de ce modèle reste limité car il ne simule pas explicitement les processus de transport horizontaux et verticaux, et son mécanisme chimique ainsi que les paramétrisations utilisées sont très simplifiés.

L'intérêt de ce modèle est donc avant tout d'ordre pédagogique, même si sa simplicité, et donc sa rapidité d'exécution, offrent la possibilité de tester facilement différentes paramétrisations ou schémas d'intégration numériques.

En développant ce modèle, j'ai acquis les compétences scientifiques nécessaires au couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Le couplage de ces modèles, présenté au chapitre suivant (chapitre 4), permettra de modéliser en 3D les interactions

entre l'ozone troposphérique et la végétation.

# 4. Modélisation 3D des interactions entre la végétation et l'atmosphère : couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE

## 4.1. Problème à résoudre

Il est nécessaire, pour mieux comprendre les interactions entre l'ozone troposphérique et la végétation, de coupler des modèles de chimie-transport nouvelle génération à des modèles de la surface terrestre, tels que les modèles CHIMERE (Menut *et al.*, 2013; Mailler *et al.*, 2017) et ORCHIDEE (Polcher *et al.*, 1998; Krinner *et al.*, 2005).

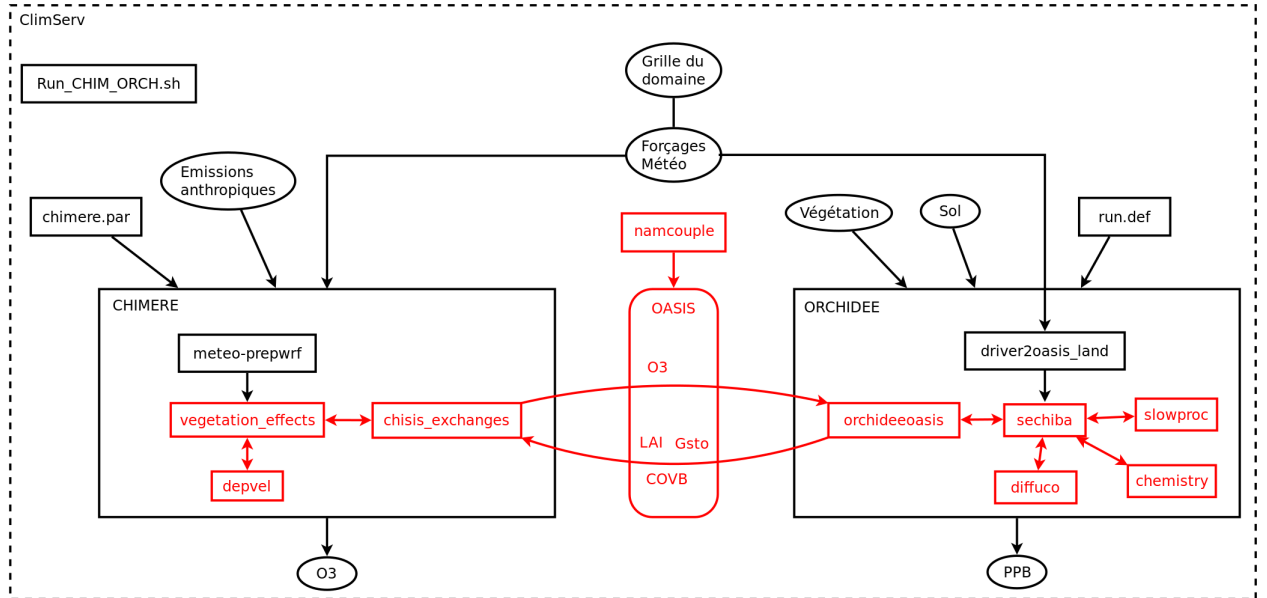
La seconde partie de ce stage consistait donc à coupler en 3D les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS (Valcke *et al.*, 2013; Craig *et al.*, 2017), en tenant compte des rétroactions entre l'ozone et la végétation.

La réalisation de ce couplage nécessite le déploiement des modèles CHIMERE et ORCHIDEE sur un même serveur de calcul, la préparation des données de forçage propres à chacun des modèles, le développement des interfaces permettant d'échanger les données entre les modèles via le coupleur OASIS, et l'ajout dans le code des modèles de la prise en compte de l'impact de l'ozone sur la végétation.

## 4.2. Solutions proposées

Le schéma de la figure 4.1 représente les différents éléments impliqués dans le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, de la configuration et du lancement des

modèles jusqu'au calcul des concentrations d'ozone et de la PPB, en passant par la lecture des données de forçage et l'échange des données entre les modèles via OASIS. Cette section décrit, en s'appuyant sur ce schéma, les différentes étapes mises en œuvre pour réaliser ce couplage.



**Figure 4.1.** – Schéma de conception du couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE via OASIS. Le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh* permet de lancer les modèles en parallèle. Ce script récupère les données de forçage (émissions anthropiques, météo, végétation, sol), les fichiers de configuration des modèles (*chimere.par* et *run.def*) et le fichier de configuration d'OASIS (*namcouple*), et les copie dans les répertoires d'exécution de chacun des modèles. Les interfaces *meteo-prepwrp* et *driver2oasis\_land* se chargent d'injecter les données de forçages météo dans les modèles. Les modèles échangent leurs données (*LAI*, *Gsto*, *COVB* et *O3*) au pas de temps horaire. Ces données, ainsi que les modules et fichiers impliqués dans le couplage via OASIS sont en rouge. Les modèles calculent à chaque pas de temps les concentrations d'ozone (*O3*) et la *PPB* impactée par l'ozone.

#### 4.2.1. Déploiement des modèles sur le serveur ClimServ

Pour coupler deux modèles, il est nécessaire que ces modèles puissent s'exécuter sur un même serveur de calcul, ou que ces modèles soit interfacés avec un outil permettant leur lancement en parallèle sur différents serveurs de calcul (*calcul distribué*). CHIMERE n'étant pas interfacé avec un tel outil, j'ai donc choisi la première solution : exécuter les modèles sur un même serveur.

J'ai choisi d'utiliser le serveur *Clim.Serv* de l'IPSL car ORCHIDEE était déjà



déployable sur ce serveur, notamment dans le cadre du développement du modèle RegIPSL (Polcher *et al.*, 2018).

J'ai donc déployé les versions de développement de CHIMERE et d'ORCHIDEE (non distribuées publiquement), en adaptant les fichiers de configurations permettant la compilation des modèles sur ClimServ (cadre en trait discontinu sur la figure 4.1). Ce travail a également été l'occasion de contribuer à la maintenance corrective des modèles, en identifiant, localisant, et en faisant remonter les anomalies aux développeurs des modèles.

Plus de détails sur le déploiement des modèles sont disponibles à l'annexe B.

### 4.2.2. Préparation des données de forçage

CHIMERE et ORCHIDEE nécessitent en entrée différentes données de forçage.

CHIMERE requiert des données météorologiques 3D, et des émissions anthropiques et biogéniques. Actuellement, les données météorologiques sont lues et préparées par le module *meteo-preprwf*. Les émissions biogéniques peuvent être calculées par le modèle MEGAN, intégré à CHIMERE.

ORCHIDEE nécessite des données atmosphériques (flux 2D à la surface), ainsi que des cartes du sol et de la végétation. Contrairement à CHIMERE, ORCHIDEE ne lit pas lui-même les données atmosphériques, mais fait appel pour cela au programme *driver2oasis\_land*, qui lit et prépare les données et les transmet à ORCHIDEE via OASIS.

Cette sous-section décrit la préparation des données de forçage nécessaires aux deux modèles. Ces données et les modules impliqués dans leur préparation sont représentés sur la figure 4.1 (données : *Forçages météo*, *Emissions anthropiques*, *Végétation* et *Sol*; modules : *meteo-preprwf* et *driver2oasis\_land*).

#### 4.2.2.1. Grille du domaine

Pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, la grille du domaine utilisée est celle construite pour l'exercice de comparaison de modèles MedCORDEX (MedCORDEX-Web). Cette grille couvre la région euro-méditerranéenne (voir annexe A), et possède une résolution de 20 km.

J'ai choisi cette grille car elle est directement utilisable par CHIMERE et ORCHIDEE (elle ne nécessite pas de pré-traitement). De plus, elle correspond à un domaine standard, régulièrement utilisé pour les simulations de CHIMERE et d'ORCHIDEE

non-couplés, et couvre la région qui nous intéresse dans le cadre de ce stage (l'Europe). Enfin, cette grille est utilisée par le modèle RegIPSL (RegIPSL-Web) pour le couplage d'ORCHIDEE avec d'autres modèles, et possède une résolution de 20 km suffisante pour étudier les interactions entre l'atmosphère et la végétation.

Cette grille est symbolisée par la bulle *Grille du domaine* sur la figure 4.1.

#### 4.2.2.2. Données météos

Les modèles CHIMERE et ORCHIDEE ont tous deux besoin de forçages météorologiques. Le forçage des modèles par des données météo évite d'avoir à coupler les modèles avec un modèle météo, et permet donc de réduire les temps de calcul. De plus, si les grilles des domaines sont les mêmes, il n'y a alors pas besoin d'interpoler les données, ce qui simplifie l'implémentation du couplage.

Pour coupler les deux modèles, il faut que ces modèles soient forcés par les mêmes données météo. Ces forçages doivent donc correspondre aux mêmes domaines spatial et temporel et avoir la même résolution. De plus, ces forçages doivent contenir les données nécessaires à chacun des modèles, ou des données permettant de construire les données nécessaires à chacun des modèles.

Les forçages météos requis par CHIMERE ont un format différent de ceux requis par ORCHIDEE : CHIMERE a besoin de champs météo 3D, alors qu'ORCHIDEE a besoin de flux de surface 2D. Nous avons d'abord essayé de générer les forçages météo à partir de données issues de réanalyses ERA-Interim, car ORCHIDEE disposait déjà d'outils permettant de générer facilement ces forçages. Malheureusement, nous nous sommes finalement rendus compte que ces données ne pouvaient être utilisées pour forcer CHIMERE, car elles ne contenaient pas les flux de chaleur dont CHIMERE a besoin. Le travail réalisé à partir des données ERA-Interim sera néanmoins réutilisable pour d'autres couplages.

L'utilisation des données ERA-Interim n'étant pas possible, nous nous sommes donc tournés vers l'utilisation de données de forçage générées par le modèle WRF, car CHIMERE est compatible avec les sorties natives de WRF. Pour cela, nous avons utilisé le couplage WRF-ORCHIDEE (existant) pour générer des flux de surface compatibles ORCHIDEE et des champs météos 3D proches des sorties natives de WRF. Ces champs 3D ne sont pas exactement les mêmes que ceux générés par WRF car l'outil de post-traitement XIOS (XIOS-Web) utilisé dans le couplage de WRF-ORCHIDEE modifie légèrement les sorties de WRF. J'ai donc adapté les sorties météo du couplage WRF-ORCHIDEE de façon à les rendre compatibles avec

CHIMERE.

### Identification des données requises par CHIMERE

Dans un premier temps, il a été nécessaire de recenser les variables météo requises par CHIMERE, afin d'indiquer au couplage WRF-ORCHIDEE quelles données il devait générer.

J'ai donc commencé par identifier ces variables météo à partir du code de CHIMERE. Ces variables sont : *ZNU*, *ZNW*, *PSFC*, *SWDOWN*, *GLW*, *Q2*, *RAIN*, *RAINNC*, *LH*, *T2*, *SNOW*, *U10*, *V10*, *SMOIS*, *PB*, *P*, *U*, *V*, *W*, *T*, *QCLOUD*, *QVAPOR*, *PH*, *PHB*, *QICE*, *P\_HYD*, *QRAIN*, *QSNOW*, *SNOWH*, *SEAICE*, *UST*, *HFX* et *PBLH* ; elles sont décrites dans le guide utilisateur de WRF (WRF-UserGuide). Puis j'ai extrait les méta-informations associées à ces variables (à l'aide de l'outil *ncdump*), de façon à définir précisément les variables à calculer par le couplage WRF-ORCHIDEE. J'ai utilisé pour cela un fichier de forçage météo compatible avec CHIMERE mais correspondant à un autre domaine.

La connaissance de ces méta-informations est importante car les modèles n'utilisent pas tous les mêmes conventions pour exprimer leurs variables. Par exemple, les températures calculées par WRF sont exprimées en  $T - 300$  K, où  $T$  est la température réelle (en K). Il est donc important de savoir si CHIMERE utilise ou non cette même convention, ou s'il réalise déjà les conversions adéquates. En ce qui concerne la température  $T$ , il se trouve que CHIMERE attend bien la température en  $T - 300$  K, et ajoute lui-même 300 K au moment de la lecture des données de forçages. Aucune conversion n'est donc nécessaire pour la température, mais ce n'est pas le cas pour d'autres variables.

### Génération par WRF-ORCHIDEE des données nécessaires

Une fois les données de forçage nécessaires à CHIMERE clairement identifiées, nous avons alors lancé une simulation du couplage WRF-ORCHIDEE sur le domaine de simulation (voir annexe A) au pas de temps horaire pour le mois de janvier 2013, pour générer les forçages météos nécessaires à CHIMERE et ORCHIDEE au format *NetCDF4*.

Pour vérifier que les données générées étaient bien complètes, j'ai écrit un script Python, *compare\_meteo\_data.py* (téléchargeable sur ?), qui compare automatiquement les données générées par le couplage WRF-ORCHIDEE aux données contenues dans un fichier de forçage météo compatible avec CHIMERE. Il vérifie que toutes les variables requises sont bien présentes, et compare le nombre de dimensions de

chacune des variables communes aux deux jeux de données. De plus, ce script génère des statistiques descriptives résumant la tendance centrale, la dispersion et la forme de la distribution pour chacune des variables communes, et écrit ces statistiques dans des fichiers CSV.

Le script *compare\_meteo\_data.py* nous a donc permis de générer les données de forçages de façon itérative, en ajustant progressivement la liste des variables à calculer par le couplage WRF-ORCHIDEE.

### **Conversion des sorties WRF-ORCHIDEE au format attendu par CHIMERE**

Pour obtenir les données de forçage nécessaires à ORCHIDEE (flux de surface), nous avons ensuite utilisé un script qui extrait ces données des sorties météo du couplage WRF-ORCHIDEE. Les données atmosphériques obtenues ainsi sont directement utilisables par ORCHIDEE, après lecture par le programme *driver2oasis\_land*.

L'obtention des données de forçage nécessaires à CHIMERE (champs météo 3D) a été plus complexe. En effet, à ce stade le couplage WRF-ORCHIDEE génère bien les données nécessaires à CHIMERE, mais dans un format différent de celui attendu par CHIMERE. De plus, certaines données sont manquantes ou n'utilisent pas les mêmes conventions.

Tout d'abord, CHIMERE ne peut lire ses données de forçage qu'à partir de fichiers au format NetCDF3. Les données de forçages générées par WRF-ORCHIDEE étant au format NetCDF4, il a donc d'abord été nécessaire de convertir ces données au format NetCDF3. J'ai utilisé pour cela l'outil en ligne de commande *ncks*, inclus dans la boîte à outils NCO (NCO-Web).

CHIMERE disposait déjà de scripts Shell de pré-traitement permettant de convertir des données météo des formats MM5 (MM5-Web) et ECMWF (ECMWF-Web) vers le format attendu par CHIMERE. J'ai donc commencé par modifier ces scripts, mais j'ai rapidement arrêté car ces scripts sont compliqués, et CHIMERE n'a de toute façon pas vocation à assurer la conversion des données issues des différents couplages existants, tel que le couplage WRF-ORCHIDEE. J'ai donc préféré écrire un script Python indépendant.

Le script que j'ai écrit (*wrforch2chim.py*, téléchargeable sur ?) réalise de façon automatisée une grande partie des adaptations nécessaires. Il vérifie d'abord que toutes les dimensions et variables nécessaires à CHIMERE sont bien présentes, liste les dimensions et variables manquantes dans le cas contraire, et vérifie les dimensions de chaque variable par rapport aux dimensions attendues (comme cela était déjà fait dans le script *compare\_meteo\_data.py*). Puis, il crée les dimensions et les

variables manquantes, et met à jour le fichier NetCDF généré par WRF-ORCHIDEE (préalablement converti au format *NetCDF3*).

Dans la plupart des cas, les données attendues par CHIMERE étaient présentes dans les sorties WRF-ORCHIDEE, mais sous un nom différent. J'ai alors créé ces données à partir de leur équivalent dans WRF-ORCHIDEE, en recopiant leur taille (pour les dimensions) et leurs attributs (pour les variables).

Dans d'autres cas, ces données étaient exprimées différemment. Par exemple, WRF-ORCHIDEE génère les dates sous la forme d'un compteur. Ce compteur indique le nombre de secondes écoulées depuis le 1er décembre 1949 à minuit. CHIMERE attend quant à lui des dates exprimées selon le calendrier grégorien, sous forme de chaîne de caractères (par exemple « 2013-01-14\_18:00:00 »). J'ai donc créé une nouvelle dimension correspondant à la longueur des chaînes de caractères servant à représenter les dates au format attendu par CHIMERE, et j'ai ensuite construit les dates sous forme de chaînes de caractères à partir des compteurs générés par WRF-ORCHIDEE.

Enfin, la variable  $P\_TOP$  (pression dans la couche la plus haute du modèle) attendue par CHIMERE, n'était tout simplement pas générée par WRF-ORCHIDEE. J'ai alors créé cette variable et je lui ai affecté une même valeur (5000 Pa) pour tous les pas de temps. Cette valeur est celle utilisée par WRF pour définir le haut de l'atmosphère simulée.

Les adaptations réalisées par le script *wrforch2chim.py* sont synthétisées dans les tableaux C.1 et C.2 de l'annexe C.

### **Modifications dans le code de CHIMERE**

Le script *wrforch2chim.py* a permis de générer des données de forçages presque compatibles avec CHIMERE. Mais il restait encore quelques ajustements à faire. En effet, le nombre de dimensions de certaines données météo peut varier selon l'origine de ces données.

Notamment, CHIMERE s'attend à ce que la première dimension des variables  $ZNU$ ,  $ZNW$ ,  $PB$  et  $PHB$  représente le temps. Or, les  $ZNU$ ,  $ZNW$ ,  $PB$  et  $PHB$  calculées par WRF-ORCHIDEE ne possèdent pas cette dimension. CHIMERE cherche donc à extraire des données possédant des dimensions auxquelles il ne s'attend pas, ce qui provoque une erreur. Cependant, bien qu'attendant des  $ZNU$ ,  $ZNW$ ,  $PB$  et  $PHB$  dont la première dimension représente le temps, CHIMERE n'utilise au final que les données correspondant au premier pas de temps.

De même, CHIMERE attend une variable  $SMOIS$  dont la seconde dimension

représente les couches du sol. Or, le *SMOIS* calculé par ORCHIDEE ne possède pas cette dimension. Là encore, CHIMERE cherche donc à extraire des données possédant des dimensions auxquelles il ne s'attend pas, ce qui provoque une erreur. Cependant, là encore, bien qu'attendant un *SMOIS* dont la seconde dimension représente les couches du sol, CHIMERE n'utilise au final que les données correspondant à la première couche.

J'ai donc modifié la subroutine *ini\_prepwrf* du module *meteo\_prepwrf* de CHIMERE de façon à détecter s'il manque une dimension par rapport au nombre de dimensions attendu pour les variables *ZNU*, *ZNW*, *PB*, *PHB* et *SMOIS*. S'il manque une dimension, alors *ini\_prepwrf* extrait toutes les données du tableau. Sinon, CHIMERE n'extrait que les données correspondant au premier pas de temps (variables *ZNU*, *ZNW*, *PB* et *PHB*) ou à la première couche (variable *SMOIS*), comme cela était fait jusqu'à présent.

#### **4.2.2.3. Autres données de forçage nécessaires**

Pour que de l'ozone puisse se former de façon réaliste, il faut également forcer CHIMERE par des émissions anthropiques. Des sources d'émissions anthropiques ont donc été générées avec le programme *emiSURF* (téléchargeable sur CHIMERE-Web) à partir de données issues de la base de données EMEP (EMEP-Web), pour notre domaine d'étude (A).

Pour quantifier plus facilement l'impact de l'ozone sur la végétation, nous avons choisi de désactiver la dynamique de la végétation dans ORCHIDEE. La distribution de la végétation doit donc être forcée par une carte de la végétation. La carte utilisée est issue de la base de données de l'ESA (ESA-Web).

Enfin, ORCHIDEE doit également être forcé par une carte décrivant la texture et la couleur du sol. J'ai choisi une carte générée à partir de la base de données de l'USDA (USDA-Web).

#### **4.2.2.4. Test des données de forçage**

Pour vérifier la validité des données de forçage, et notamment des forçages météo et atmosphériques générés pour le couplage, j'ai lancé une simulation d'un mois (30 premiers jours de janvier 2013) sur le serveur ClimServ avec chacun des modèles en les forçant avec ces données. Les résultats de ces simulations sont présentés à la section 4.3.

### 4.2.3. Implémentation du couplage

Cette section décrit l'implémentation du couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE via le coupleur OASIS. Cette implémentation comprend les modifications apportées aux modèles CHIMERE et ORCHIDEE (boîtes *CHIMERE* et *ORCHIDEE* sur la figure 4.1) pour tenir compte de l'impact de l'ozone sur la végétation (modules *vegetation\_effects*, *depvel*, *sechiba*, *diffuco*, *slowproc* et *chemistry* sur la figure 4.1). Cette implémentation inclut également le développement des interfaces OASIS nécessaires à l'échange des données entre les modèles, et l'écriture du fichier de configuration d'OASIS (modules *chisis\_exchange* et *orchideeoasis*, et fichier *namcouple* de la figure 4.1).

#### 4.2.3.1. Identification des paramètres à échanger

Avant d'implémenter le couplage, il a été nécessaire d'identifier les paramètres à échanger entre les modèles.

Les émissions de COV biogéniques et la conductance stomatique sont modélisées à la fois par CHIMERE et par ORCHIDEE. CHIMERE étant un modèle de chimie-transport, et ORCHIDEE un modèle de surface, j'ai choisi que les émissions de COV et la conductance stomatique seraient modélisées par ORCHIDEE.

Ainsi, dans ce couplage, CHIMERE calcule et envoie à ORCHIDEE les concentrations d'O<sub>3</sub> de surface, et ORCHIDEE calcule et envoie à CHIMERE le LAI, la conductance stomatique et les émissions de COV biogéniques. Ces paramètres correspondent respectivement aux bulles *O3*, *LAI*, *Gsto* et *COVB* sur la figure 4.1. Ces échanges se font au pas de temps horaire.

Note au lecteur : au moment de la rédaction de ce mémoire, les émissions de COV biogéniques ne sont pas encore échangées entre les modèles. Les sections suivantes ne décriront donc pas ces échanges. A terme, les émissions de COV biogéniques utilisées dans ce couplage seront calculées par le module *chemistry* de la figure 4.1.

#### 4.2.3.2. CHIMERE

Le LAI et la conductance stomatique calculés par ORCHIDEE et envoyés à CHIMERE dépendent du type de végétation. Or, les types de végétation représentés dans CHIMERE et dans ORCHIDEE sont différents. Il est donc nécessaire, pour coupler CHIMERE et ORCHIDEE via le LAI et la conductance stomatique, d'associer et d'agréger les types de végétation des deux modèles. Ces transformations sont

décrites à l'annexe D, et ont été codées dans le nouveau module *vegetation\_effects* de CHIMERE. Ce module assure également le liaison entre l'interface OASIS *chisis\_exchange* et le module de calcul de la vitesse de dépôt *depvel* de CHIMERE. Des détails techniques concernant l'implémentation de ce module se trouvent à l'annexe E.1.

Dans notre couplage, CHIMERE doit utiliser la conductance stomatique calculée par ORCHIDEE ( $G_{sto}$ ). Or, la conductance calculée par ORCHIDEE correspond à la conductance stomatique moyenne pour le  $\text{CO}_2$  et est exprimée en  $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ , alors que la conductance attendue par CHIMERE correspond à la conductance pour l'ozone et est exprimée en  $\text{cm s}^{-1}$ . Il est donc nécessaire, pour que CHIMERE puisse utiliser la conductance calculée par ORCHIDEE, de réaliser la conversion suivante :

$$g_{sto,\text{O}_3} = g_{sto,\text{CO}_2} \times \sqrt{\frac{M_{\text{CO}_2}}{M_{\text{O}_3}}} \times \frac{1000}{410} \quad (4.1)$$

avec  $g_{sto,\text{CO}_2}$  la conductance calculée par ORCHIDEE,  $g_{sto,\text{O}_3}$  la conductance attendue par CHIMERE,  $M_{\text{CO}_2} = 44$  la masse molaire du  $\text{CO}_2$  (en  $\text{g mol}^{-1}$ ),  $M_{\text{O}_3} = 48$  la masse molaire de l' $\text{O}_3$  (également en  $\text{g mol}^{-1}$ ), 1000 le facteur pour convertir les mol en mmol, et  $1/410$  le facteur de conversion des  $\text{mmol O}_3 \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  en  $\text{cm s}^{-1}$ . Le facteur  $1/410$  est calculé à partir de la loi des gaz parfaits ( $RT/P = 1/41000$ ), en conditions standards de température et de pression. Cette conversion est faite dans le module *depvel* de CHIMERE. C'est également dans ce module que CHIMERE utilise le LAI calculé par ORCHIDEE, et tient compte ainsi des rétroactions de la végétation sur les concentrations d'ozone.

#### 4.2.3.3. ORCHIDEE

Le module *sechiba* est le module principal du modèle SECHIBA. Il appelle les différentes routines permettant notamment le calcul de la conductance stomatique (*diffuco*), du LAI (*slowproc*) et des émissions de COV biogéniques (*chemistry*). Le module *sechiba* est également en lien direct avec l'interface OASIS *orchideeoasis*. Des détails techniques concernant l'implémentation de ce module se trouvent à l'annexe E.2.

Le module *diffuco* calcule l'impact de l' $\text{O}_3$  de surface sur la PPB et la conductance stomatique, d'après les paramétrisations d'Anav *et al.* (2011, 2012) et de Felzer *et al.* (2002) (équations 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 et 2.7 des sections 2.3.1.1 et 2.3.1.1). ORCHIDEE



utilise ensuite la PPB impactée pour calculer le LAI (module *slowproc*), et envoie le LAI et la conductance stomatique impactés par l’ozone à CHIMERE. L’algorithme permettant le calcul de cet impact est décrit à l’annexe F.

#### 4.2.3.4. Interfaces OASIS

Le fichier *namcouple* d’OASIS décrit les champs échangés entre les modèles couplés, et d’autres paramètres du couplage tels que le temps d’exécution total ou le niveau de débogage souhaité.

Pour les couplages existants de CHIMERE et d’ORCHIDEE avec d’autres modèles (CHIMERE-WRF et NEMO-ORCHIDEE par exemple), ce fichier est généré automatiquement à partir des paramètres de chacun des modèles.

Pour pouvoir générer automatiquement le *namcouple* du couplage CHIMERE-ORCHIDEE, il faudrait soit intégrer CHIMERE à libIGCM, soit intégrer ORCHIDEE à CHIMERE (comme cela est fait pour le couplage WRF-CHIMERE).

La solution la plus propre consisterait à intégrer CHIMERE à libIGCM. Cela permettrait de coupler facilement CHIMERE avec les modèles déjà intégrés à libIGCM (NEMO, WRF et ORCHIDEE notamment). C’est la solution prévue pour le développement du modèle RegIPSL.

Mais intégrer CHIMERE à libIGCM est long et compliqué car CHIMERE utilise de nombreux scripts de pré et post-traitements imbriqués et difficiles à utiliser via libIGCM.

Pour gagner du temps, j’ai donc choisi d’adapter manuellement le fichier *namcouple* définissant les champs échangés entre le driver *driver2oasis\_land* et ORCHIDEE, et développé pour le couplage d’ORCHIDEE et de NEMO.

#### Paramètres généraux du couplage

Le driver *driver2oasis\_land* est considéré comme un modèle par OASIS. Dans le *namcouple*, j’ai donc indiqué le couplage se faisait entre trois modèles : *orchid* (modèle ORCHIDEE), *driver* (driver *driver2oasis\_land*) et *chimer* (modèle CHIMERE).

J’ai ensuite indiqué dans le *namcouple* le temps total de la simulation en secondes. Pour une simulation de 30 jours, le temps total de la solution est donc égal à 2592000 s.

## Champs échangés entre les modèles

Il faut ensuite indiquer dans le fichier `namcouple` les champs à échanger entre les modèles, et les paramètres décrivant ces champs.

Pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, ces champs sont :

- les données de forçages atmosphériques récupérées par le driver `driver2oasis_land` et transmises à ORCHIDEE,
- la conductance stomatique et le LAI pour chacun des 13 types de végétation d'ORCHIDEE, envoyés par ORCHIDEE à CHIMERE,
- et les concentrations d'ozone de surface, envoyées par CHIMERE à ORCHIDEE.

OASIS permet normalement d'échanger plusieurs variables au travers d'un même champs, mais l'interface CHISIS de CHIMERE ne supporte pas cette fonctionnalité. CHIMERE et d'ORCHIDEE n'échangeront donc qu'une variable par champ.

Tous ces champs sont échangés au pas de temps horaire. Pour chacun des champs, la fréquence d'échange est donc égale à 3600 s.

Les autres paramètres des champs échangés (taille des tableaux, identifiants des grilles, etc.) sont encore en cours de débogage. Ils seront documentés lorsque le couplage sera opérationnel.

## Gestion des dead-locks

Au lancement d'une simulation, deux modèles couplés peuvent avoir besoin, pour s'initialiser, de données envoyées par l'autre modèle. Par exemple, ORCHIDEE a besoin des concentrations d'O<sub>3</sub> calculées par CHIMERE, et CHIMERE a besoin du LAI et de la conductance stomatique calculés par ORCHIDEE. Si les deux modèles cherchent à récupérer ces données au même moment, ils attendent alors indéfiniment les données de l'autre modèle, ce qui entraîne un blocage du programme (*deadlock*, ou *interblocage*).

Pour éviter ces blocages, OASIS permet de configurer un décalage (*LAG*) pour les champs devant être reçus au même pas de temps par chacun des modèles. Concrètement, lorsque le LAG associé à un champ est positif, au moment de récupérer le champs, OASIS va utiliser la valeur du champ reçu au pas de temps précédent. Le LAG utilisé doit être inférieur à la durée du pas de temps du couplage, car autrement les modèles utiliseraient des valeurs obsolètes (plus d'un pas de temps d'écart).

Cependant, si les modèles ont besoin de ces données au lancement de la simulation, c'est-à-dire au premier pas de temps, comme c'est le cas pour CHIMERE et OR-

CHIDEE, aucun champ n'a encore été reçu à ce moment là par les modèles (aucun pas de temps ne précède celui du début de la simulation). Pour remédier à ce problème, les champs échangés via OASIS peuvent être associés à un fichier contenant des valeurs initiales. Si un champs possède un LAG positif, il pourra alors utiliser ces valeurs au premier pas de temps de simulation. Ces fichiers de valeurs initiales sont appelés fichiers *restart*, car ils servent également à reprendre une simulation là où elle s'était arrêtée.

Pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, la conductance stomatique, le LAI et les concentrations d'O<sub>3</sub> sont échangés au pas de temps horaire, soit 3600 s. Il suffit donc d'indiquer un LAG inférieur à 3600 s. J'ai choisi pour ma part un LAG de 1800 s. Il n'est pas nécessaire de renseigner un LAG pour les données de forçage atmosphériques, car ces données sont déjà disponibles au lancement de la simulation (elles ont été pré-calculées).

Un même fichier restart peut être utilisé pour initialiser toutes les variables échangées. Ce fichier doit être au format NetCDF, et contenir un tableau 1D de la taille du domaine (*nlongitude*, *nlatitude*) pour chacune des variables à échanger.

Les tableaux du fichier restart peuvent par exemple n'être rempli que de zéros. Si c'est le cas, il faut s'assurer que les variables échangées ne sont pas utilisées comme quotient dans les formules mathématiques du modèle. Autrement, il faut gérer le cas où ces variables sont nulles (en leur donnant par exemple une valeur très faible), de façon à éviter les divisions par zéro.

Enfin, le fichier restart doit être en lecture et en écriture, car OASIS va écrire dedans à chaque pas de temps, de façon à pouvoir récupérer à chaque pas de temps la valeur au pas de temps précédent.

J'ai écrit un script Python permettant de générer ce fichier restart (*create\_restart\_file.py*, téléchargeable sur ?).

#### 4.2.4. Script pour lancement des modèles en parallèle

CHIMERE peut être lancé au moyen d'un ensemble de scripts qui assurent la configuration, la compilation et l'exécution du modèle.

ORCHIDEE peut quant à lui être lancé soit via la bibliothèque libIGCM, soit via un ensemble de scripts.

Comme nous l'avons déjà vu à la section 4.2.3.4, la solution la plus propre pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE consisterait à intégrer CHIMERE à libIGCM. Mais cette solution est relativement longue et complexe à mettre en œuvre.

En effet, cela sous entendrait, outre le développement des interfaces nécessaires dans CHIMERE, de créer une nouvelle configuration libIGCM pour piloter le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE. La création de ces configurations suppose la préparation de nombreux fichiers de configuration et scripts, permettant d'automatiser la configuration des modèles, la génération du fichier namcouple OASIS, la configuration des post-traitements, et le lancement en parallèle des modèles sur différentes machines de calculs (libIGCM Web).

Pour gagner du temps, j'ai donc choisi de réutiliser des scripts existants, et de les adapter pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE (boîte *Run\_CHIM\_ORCH.sh* de la figure 4.1). J'ai pour cela procédé de façon itérative.

### **Test de reproductibilité**

J'ai d'abord adapté les scripts existants de façon à lancer ORCHIDEE sur le domaine utilisé pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, en forçant ORCHIDEE par les données atmosphériques préparées à la section 4.2.2, via le driver *driver2oasis\_land*. Ce premier test m'a permis de m'assurer de la reproductibilité des traitements réalisés par ces scripts, lors de leur application à un autre domaine et à d'autres jeux de données de simulation.

### **Lancement en parallèle sans rétroaction**

J'ai ensuite adapté ces scripts de façon à lancer les modèles CHIMERE et ORCHIDEE en parallèle, mais sans communication entre les modèles. Pour le distinguer des versions précédentes, j'ai alors renommé le script principal en *Run\_CHIM\_ORCH.sh*.

Pour cela, j'ai d'abord suffixé toutes les variables globales par « *\_ORCH* », de façon à éviter les conflits entre les variables définies pour ORCHIDEE et celles définies pour CHIMERE.

J'ai ensuite ajouté l'appel au script de lancement de CHIMERE (*chimere.sh*). Le script que j'ai utilisé pour ce test correspond à une version légèrement modifiée du script original. Ces modifications permettent d'arrêter le script juste avant l'exécution de CHIMERE.

Puis, j'ai ajouté le lancement des modèles CHIMERE et ORCHIDEE en parallèle au moyen de la commande *mpirun*.

Une fois l'exécution des deux modèles terminée, le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh* lance alors les post-traitements propres à chaque modèle.

### Lancement en parallèle avec rétroaction

Enfin, j'ai complété le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh* de façon à faire communiquer CHIMERE et ORCHIDEE via OASIS.

Pour cela, j'ai modifié le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh* de façon à ce que CHIMERE et ORCHIDEE utilisent maintenant tous deux le même fichier namcouple, préparé à la section 4.2.3.4. Ainsi, une fois la configuration des deux modèles terminée (et donc juste avant le lancement en parallèle des modèles via la commande *mpirun*), le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh* copie le fichier namcouple dans le répertoire d'exécution propre à chacun des modèles.

Pour indiquer à CHIMERE qu'il doit maintenant s'exécuter en étant couplé à ORCHIDEE, j'ai ajouté au fichier de configuration de CHIMERE (*chimere.par*) l'option *online\_orch*. Si cette option est à 1, alors CHIMERE cherchera à récupérer la conductance stomatique et le LAI calculés par ORCHIDEE, et enverra à ORCHIDEE les concentrations d'O<sub>3</sub> qu'il calcule.

Actuellement les versions d'OASIS utilisées par CHIMERE et ORCHIDEE sont légèrement différentes. Or, dans un même couplage, l'utilisation de deux versions différentes d'OASIS, ou d'une même version compilée avec des options de compilation différentes, peut entraîner des erreurs à l'exécution. Ces erreurs sont appelées communément des « conflits de versions ». Pour éviter ces conflits, j'ai donc créé des liens symboliques de façon à ce que CHIMERE utilise la version d'OASIS compilée par ORCHIDEE. J'ai également désactivé la compilation d'OASIS par CHIMERE dans le script de lancement de CHIMERE (*chimere.sh*).

Pour le moment, l'option *online\_orch* n'est pas pilotée pas le script *Run\_CHIM\_ORCH.sh*, et doit être renseignée manuellement. De même, chaque modèle utilise son propre fichier de configuration (CHIMERE : *chimere.par*, ORCHIDEE : *run.def*), et la cohérence des valeurs renseignées dans ces fichiers n'est pas vérifiée.

## 4.3. Résultats

La préparation des données météo de forçage ayant pris plus de temps que prévu, le couplage n'est pas encore opérationnel.

Cette section présente donc uniquement les résultats des simulations des modèles non-couplés forcés par les données de forçage météo préparées. Un parallèle sera fait entre les résultats obtenus avec CHIMERE et ceux obtenus avec le modèle 0D développé au chapitre précédent (chapitre 3).

Quand le couplage sera opérationnel, les résultats des modèles non-couplés pourront alors être comparés à ceux obtenus avec les modèles couplés.

### 4.3.1. Simulations réalisées

Pour chacun des modèles, j'ai réalisé une simulation de 1 mois (janvier 2013) sur le serveur ClimServ à partir des données météo préparées à la section 4.2.2.

CHIMERE calcule les concentrations d'ozone au pas de temps horaire. ORCHIDEE calcule la PPN (*Productivité Primaire Nette*) au pas de temps journalier (modèle STOMATE activé), notamment pour les cultures en C3 et en C4. J'ai choisi de calculer la PPN plutôt que la PPB car à cette période de l'année les cultures n'ont pas encore émergé et il n'y a donc pas de production de biomasse.

### 4.3.2. Concentration d'ozone à la surface

La figure 4.2 représente les concentrations d'O<sub>3</sub> à la surface (en ppb) simulées par le modèle CHIMERE au pas de temps horaire.

La figure 4.2a représente la carte des concentrations de surface calculées pour le 30 janvier 2013 à 16 h. On observe que les concentrations d'O<sub>3</sub> vont d'environ 10 ppb jusqu'à environ 65 ppb. Ces concentrations sont inférieures à 50 ppb sur la plus grande partie du continent européen, et supérieures à 50 ppb au niveau de l'océan atlantique, du bassin méditerranéen et de l'Afrique du Nord.

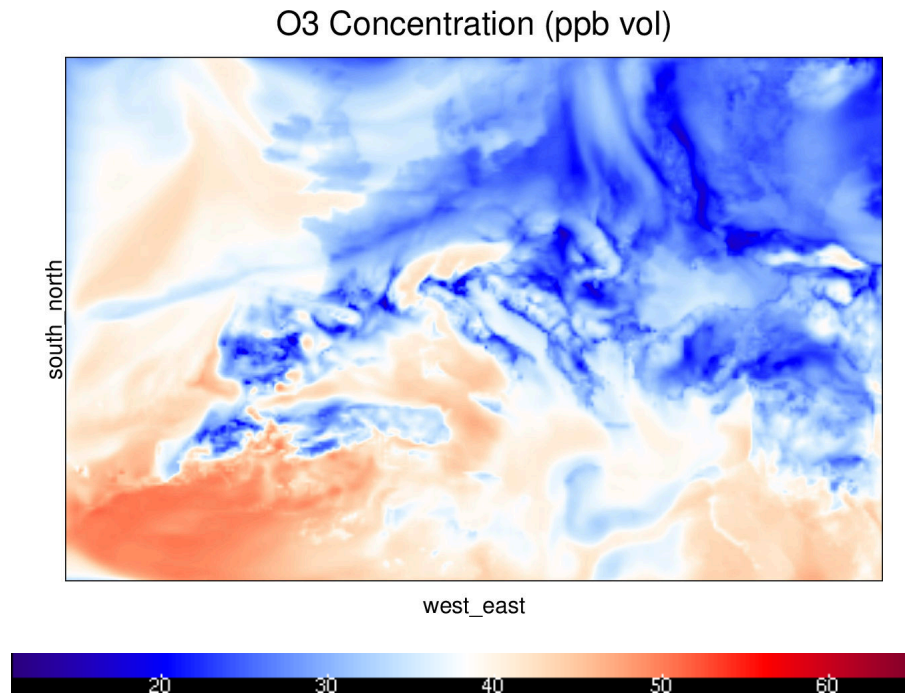
La figure 4.2a représente l'évolution temporelle de la moyenne des concentrations d'ozone de surface calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013. Cette moyenne vaut environ 27 ppb en début de simulation, puis atteint, après environ 1 jour de simulation, une valeur oscillant entre environ 32 et 35 ppb.

### 4.3.3. Productivité Primaire Nette pour les cultures en C3 et C4

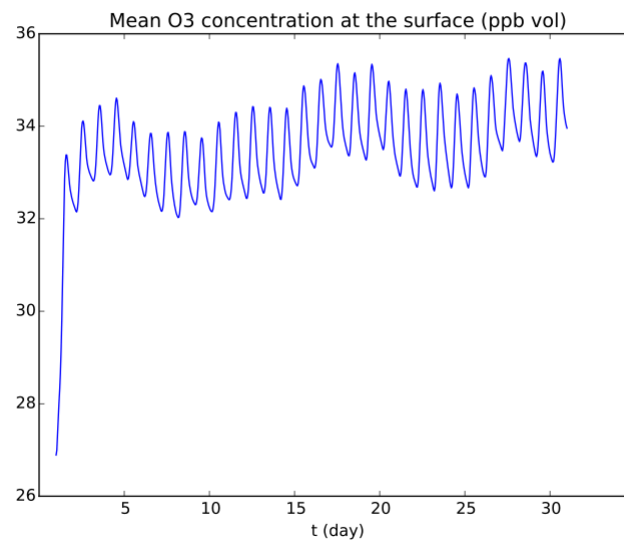
Les figures 4.3 et 4.4 représentent les PPN (en gC jour<sup>-1</sup> m<sup>-2</sup>) simulées par le modèle ORCHIDEE au pas de temps journalier, pour les cultures en C3 (figure 4.3) et pour les cultures en C4 (figure 4.4).

Les figures 4.3a et 4.4a représentent les cartes des PPN calculées pour le 30 janvier 2013. On observe que ces PPN sont négatives, et vont d'environ -0.6 à 0.0 gC jour<sup>-1</sup> m<sup>-2</sup>. Ces PPN sont plus faibles en Europe qu'en Afrique du Nord.

Les figures 4.3b et 4.4b représentent l'évolution temporelle des moyennes des PPN calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013. Ces moyennes sont



(a)



(b)

**Figure 4.2.** – Concentrations d'O<sub>3</sub> à la surface (en ppb) simulées par le modèle CHIMERE non couplé, à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.2a représente la carte des concentrations calculées pour le 30 janvier 2013 à 16 h. La figure 4.2b représente l'évolution temporelle de la moyenne des concentrations d'ozone calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013.

négatives, et vont de  $-0.038$  à  $-0.030$  gC jour<sup>-1</sup> m<sup>-2</sup>. Elles ne suivent pas de cycle particulier.

## 4.4. Discussion des résultats

### 4.4.1. Concentration d’ozone à la surface

L’amplitude des concentrations d’ozone calculées (figure 4.2a) correspond bien aux concentrations contemporaines observées aux latitudes tempérées de l’hémisphère nord (entre  $\sim 40$  et  $65$  ppb d’après Oltmans *et al.*, 2006). De plus, la moyenne des concentrations calculées (figure 4.2b) est proche des moyennes observées ( $\sim 40$  ppb d’après Wittig *et al.*, 2009).

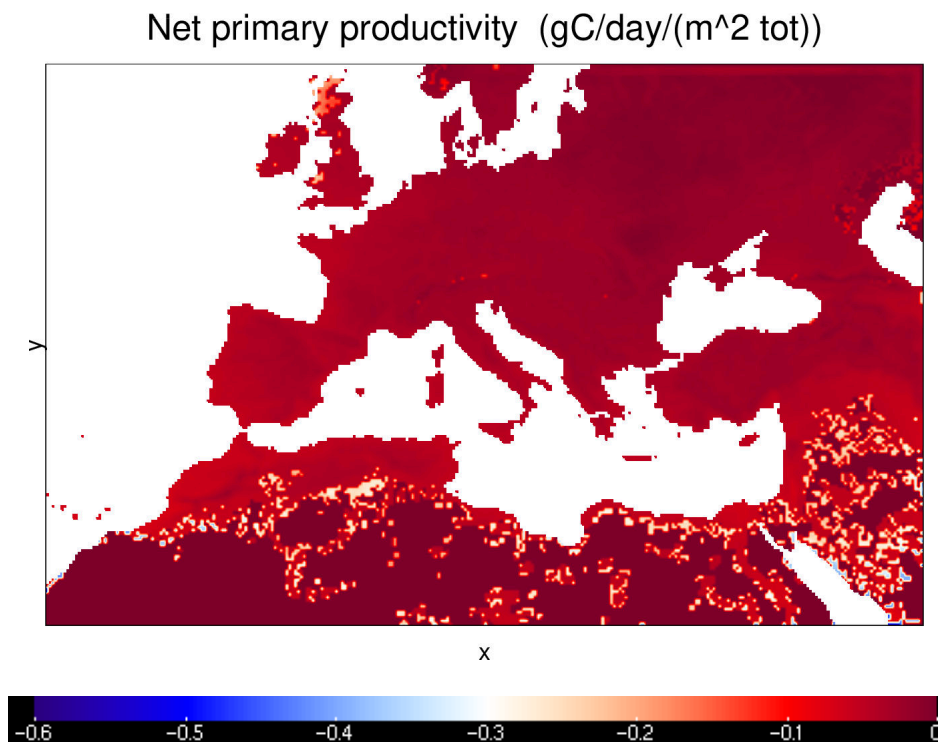
Les *embruns marins* sont des aérosols enlevés par le vent à la crête des vagues ou formés par le ressac. Ces aérosols peuvent réagir pour former de l’ozone troposphérique (Finlayson-Pitts, 2003). CHIMERE permet de tenir compte des émissions de sels marins dans le calcul des concentrations chimiques de l’atmosphère. L’ensoleillement étant limité en hiver, davantage d’ozone se forme lors de la réaction des sels marins que lors de la réaction des oxydes d’azote et des COV. C’est pour cette raison que l’on observe des concentrations d’ozone plus élevées à la surface de l’océan que sur le continent européen. Par contre, les concentrations d’ozone sont maximales en Afrique du Nord car l’ensoleillement dans ces régions favorise la formation de l’ozone même en hiver.

En début de simulation, la moyenne de 27 ppb correspond aux concentrations d’origine climatologique. Ces concentrations sont faibles, ce qui est normal en hiver. Le temps, de l’ordre d’une journée, que met cette moyenne pour passer d’environ 27 ppb à environ 33 ppb correspond au temps d’initialisation nécessaire à CHIMERE. La valeur de 33 ppb atteinte après cette initialisation est alors représentative du domaine et de la période simulée.

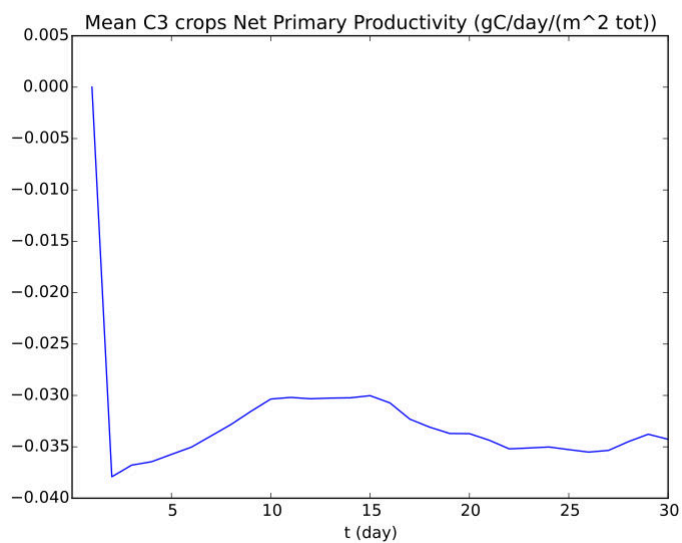
Les jours suivants, les concentrations varient suivant un cycle diurne, qui correspond au cycle de formation et de destruction de l’ozone. Ce cycle diurne est ici de faible amplitude et correspond bien aux valeurs moyennes observées habituellement pour un mois de janvier. Le fait que cette moyenne ait été réalisée à la fois sur terre et sur mer explique la faible amplitude observée (de l’ordre de 2 ppb).

La comparaison de ces résultats avec ceux du modèle 0D n’est pas évidente car les paramètres utilisés ne correspondent pas à la même saison. De plus, les para-



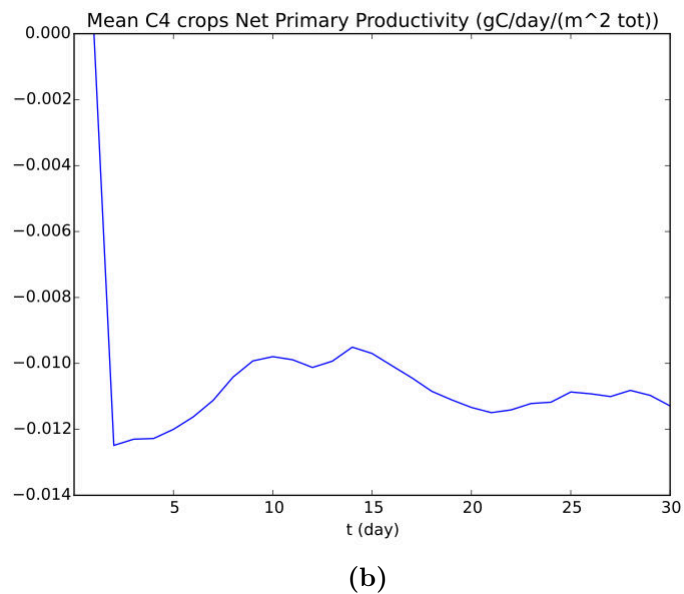
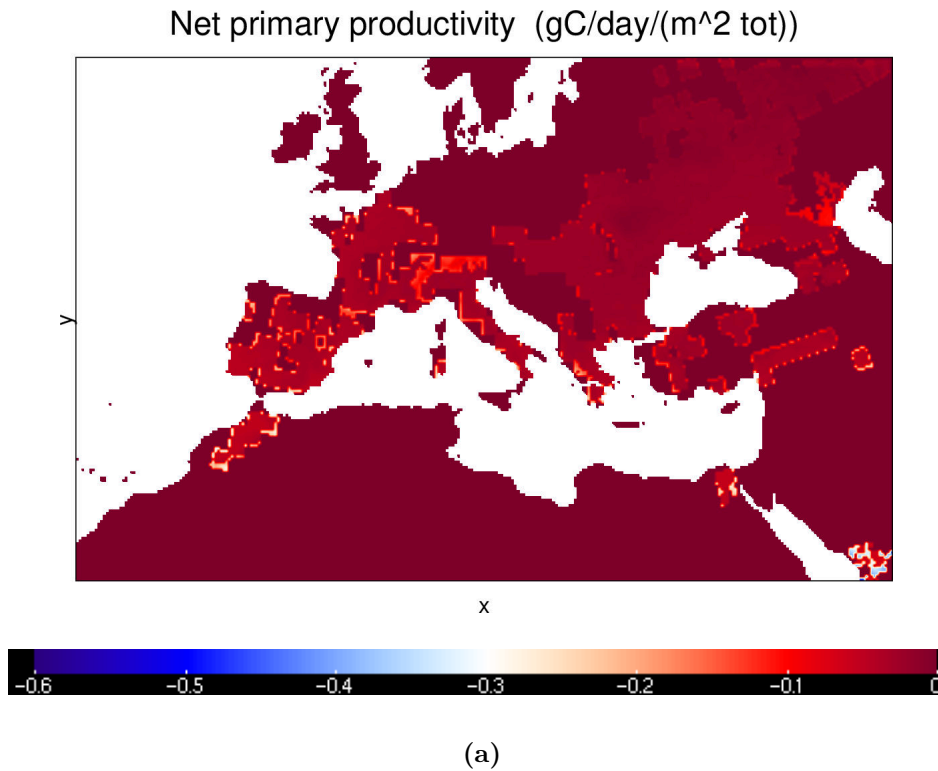


(a)



(b)

**Figure 4.3.** – Productivité primaire nette pour les cultures en C3 ( $PPN_{C3}$ , en  $\text{gC jour}^{-1} \text{m}^{-2}$ ), simulée par le modèle ORCHIDEE non couplé à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.3a représente la carte des  $PPN_{C3}$  calculées pour le 30 janvier 2013. La figure 4.3b représente l'évolution temporelle de la moyenne des  $PPN_{C3}$  calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013.



**Figure 4.4.** – Productivité primaire nette pour les cultures en C4 ( $PPN_{C4}$ , en  $\text{gC jour}^{-1} \text{m}^{-2}$ ), simulée par le modèle ORCHIDEE non couplé à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.4a représente la carte des  $PPN_{C4}$  calculées pour le 30 janvier 2013. La figure 4.4b représente l'évolution temporelle de la moyenne des  $PPN_{C4}$  calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013.

mètres utilisés pour le modèle 0D correspondent à un environnement de type urbain à l'échelle d'une ville en été, alors que dans la simulation faite avec CHIMERE, les concentrations sont calculées à l'échelle du continent européen pour un mois de janvier. Il serait donc intéressant, pour comparer les résultats des deux modèles, de simuler les concentrations d'ozone avec le modèle 0D sur une région correspondant à la maille centrale du domaine utilisé par CHIMERE, et pour des conditions climatiques correspondant à un mois de janvier. On peut néanmoins déjà noter que le cycle diurne de l'ozone apparaît clairement avec les deux modèles, et que les concentrations calculées sont du même ordre de grandeur (autour de 40 ppb).

#### 4.4.2. Productivité Primaire Nette pour les cultures en C3 et C4

La PPN correspond à l'énergie accumulée par la plante par le biais de la photosynthèse, moins l'énergie utilisée par la plante pour la respiration (WMO, 2018). En hiver, il y a moins de lumière donc moins de photosynthèse. Par contre, les plantes consomment quand même de l'énergie pour initier leur développement. Elles puisent donc dans leurs réserves, ce qui explique que la PPN soit négative en cette période.

En Afrique du Nord, il y a moins de végétation caduque qu'en Europe. Il est donc normal qu'en hiver les PPN simulées en Afrique du Nord soient légèrement supérieures à celles simulées en Europe.

La PPN suit le rythme de développement de la végétation, qui est souvent saisonnal en Europe. Il est donc normal que l'on ne perçoive pas ce cycle en calculant uniquement la PPN pour le mois de janvier. Il faudrait pour cela faire une simulation d'une année entière.

Enfin, la PPN est généralement calculée par an, et non par mois. De plus, les données que j'ai trouvées dans la littérature sont des moyennes des PPN calculées pour tous les types de végétation confondus. Par exemple, Krinner *et al.* (2005) ont simulé avec ORCHIDEE la moyenne annuelle de la PPN de tous les types de végétation à l'échelle globale (c-à-d à l'échelle de la Terre entière) pour les années 1997 à 1999. En Europe, ils ont trouvé une concentration moyenne égale à environ  $550 \text{ gC année}^{-1} \text{ m}^{-2}$ . Mais cette valeur ne peut être utilisée pour valider les PPN que j'ai calculées lors de ma simulation, car elle ne s'applique pas aux mêmes domaines spatial et temporel. Pour obtenir des résultats significatifs et comparables avec les résultats de la littérature, il faudrait à minima faire une simulation d'une année entière. La génération des données météo pour le domaine de simulation nécessitant un temps de calcul relativement long, et la priorité étant plutôt centrée pour le

moment sur la finalisation du couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE, ces données météo n'ont pas encore été générées. Ces test seront donc réalisés quand le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE sera opérationnel.

## 4.5. Conclusion

Les données de forçage météo préparées m'ont permis de lancer des simulations avec les modèles CHIMERE et ORCHIDEE non couplés. Les résultats de ces simulations semblent réalistes, même si la PPN ne peut être validée avec une simulation sur le seul mois de janvier 2013. Les concentrations d'ozone calculées par CHIMERE sont du même ordre de grandeur que celles calculées par le modèle 0D. Pour comparer les résultats des deux modèles (modèle 0D et CHIMERE), il serait intéressant de simuler les concentrations d'ozone avec le modèle 0D sur une région correspondant à la maille centrale du domaine utilisé par CHIMERE, et pour des conditions climatiques correspondant à un mois de janvier.

Le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE est encore en cours de développement, et ne permet pas d'obtenir de résultats pour le moment. Les modèles semblent échanger des données, mais des erreurs stoppent rapidement l'exécution du programme. Je vais donc poursuivre ces développements, et je présenterai les résultats obtenus lors de ma soutenance.

Le couplage sera d'abord testé sur le mois de janvier 2013, puis sur toute l'année 2013. Les résultats de ce couplage pourront alors être comparés aux résultats obtenus avec CHIMERE et ORCHIDEE non couplés. Puis ils seront comparés aux résultats obtenus par Anav *et al.* (2012).

# 5. Conclusions

## 5.1. Mission et travail réalisés

La mission de ce stage consistait à coupler les modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS.

Pour cela, j'ai commencé par réaliser une étude bibliographique, pour dresser un bilan de l'existant et de ses limites. Puis, j'ai développé un modèle 0D de la chimie de l'ozone troposphérique, de façon à acquérir les compétences scientifiques nécessaires au couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Enfin, j'ai implémenté le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS, afin d'étudier les interactions entre la végétation et l'atmosphère, et quantifier l'impact de l'ozone sur le rendement des grandes cultures.

Le développement du modèle 0D m'a permis de bien comprendre les processus impliqués dans les interactions entre l'atmosphère et la surface terrestre. La conception générique de ce modèle permet également de tester rapidement différentes paramétrisations, et d'étudier la stabilité de différents schémas d'intégration numériques.

Le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE nécessitait la préparation de données de forçage météo compatibles avec les deux modèles. J'ai préparé ces données, et j'ai ainsi pu lancer des simulations de CHIMERE et d'ORCHIDEE non couplés, sur le même domaine de simulation et à partir des mêmes jeux de données atmosphériques. Les résultats de ces simulations ont été concluants.

Enfin, le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE nécessitait l'implémentation, dans le code des modèles, des rétroactions entre l'ozone et la végétation et de l'échange via OASIS des paramètres du couplage. Cette implémentation est encore en cours de développement.

## 5.2. Compétences développées

Ce stage m'a tout d'abord permis d'acquérir des compétences en modélisation de la chimie de l'ozone troposphérique, et dans la paramétrisation des processus physiques intervenant dans la formation et la destruction de cet ozone. D'un point de vue scientifique, j'ai également beaucoup appris sur le fonctionnement de la végétation, et sur les interactions entre l'ozone et cette végétation.

J'ai ensuite acquis de nouvelles compétences en utilisant et en modifiant des codes de calcul complexes, et en réalisant le couplage online de modèles. J'ai ainsi pu me familiariser avec de nombreux outils largement utilisés pour le développement des ESM.

Enfin, ce stage m'a permis d'accroître mes compétences en gestion de projet (organisation, planification, animation, etc.), en rédaction de documents scientifiques (étude bibliographique, mémoire), et dans la présentation de mes résultats à l'oral. Je pense avoir pris davantage conscience de la nécessité d'expliquer et de justifier systématiquement mes choix et mes résultats. De plus, ce stage m'a appris à toujours garder à l'esprit le but scientifique à atteindre, et non plus uniquement à trouver la meilleure solution technique à mettre en œuvre, comme j'avais pris l'habitude de le faire dans mon métier d'ingénieur d'étude informaticien en appui à la recherche.

## 5.3. Perspectives

Les perspectives sont nombreuses. Il y a les perspectives à court terme, qui me concernent directement, et celles à plus long terme.

A court terme, et si possible d'ici ma soutenance, je compte finaliser le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE via le LAI, la conductance stomatique et les concentrations d'ozone. Je testerai alors d'abord ce couplage sur 1 mois, puis sur 1 an de simulation. Les développements réalisés seront transférés aux développeurs des modèles, et je présenterai mes résultats à mon équipe INRA.

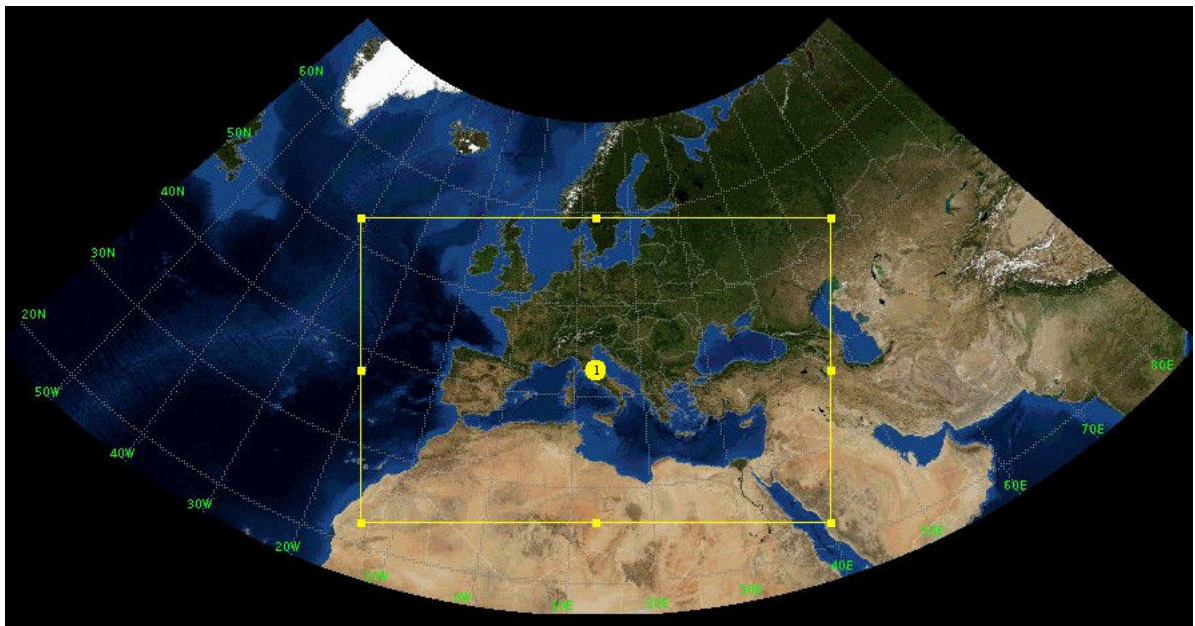
A moyen et long termes, il s'agira d'abord de comparer les résultats obtenus avec ce couplage aux résultats obtenus par Anav *et al.* (2012), qui n'avaient pas utilisé OASIS. Puis, il faudrait modifier le nouveau couplage de façon à ce que CHIMERE utilise les émissions de COV biogéniques calculées par ORCHIDEE. Les résultats devront également être comparés à ceux obtenus avec d'autres modèles, et valider par rapport aux données mesurées pour différents sites d'observation.

A terme, ce couplage sera également intégré au modèle RegIPSL (Pennel *et al.*, 2018; Polcher *et al.*, 2018). Par ailleurs, il serait intéressant de tester de nouvelles paramétrisations qui tiennent compte notamment de la contribution du dépôt non-stomatique dans le calcul de la résistance de surface, ou qui utilisent des relations flux-impact pour estimer l'impact de l'ozone sur la végétation. Ces paramétrisations pourraient d'abord être testées dans le modèle 0D avant d'être implémentées dans les modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Enfin, il serait intéressant d'étudier la stabilité de différents schémas d'intégration numériques appliqués au modèle 0D, de façon à optimiser l'intégration des équations de ce modèle.

# A. Domaine du couplage CHIMERE-ORCHIDEE

La figure A.1 représente la projection de Lambert du domaine utilisé pour tester le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Ce domaine s'étend de  $-20^{\circ}\text{W}$  à  $60^{\circ}\text{E}$  en longitude, et de  $10^{\circ}\text{S}$  à  $60^{\circ}\text{N}$  en latitude, avec une résolution de 20 km. Ce domaine est un domaine standard, régulièrement utilisé pour les simulations de CHIMERE et d'ORCHIDEE non-couplés, et utilisé dans le cadre du projet RegIPSL (RegIPSL-Web) pour le couplage d'ORCHIDEE avec d'autres modèles. De plus, ce domaine couvre la région qui nous intéresse dans le cadre de ce stage (l'Europe), et possède une résolution de 20 km suffisante pour étudier les interactions entre l'atmosphère et la végétation.





**Figure A.1.** – Projection de Lambert du domaine (rectangle jaune) utilisé pour le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Ce domaine s'étend de  $-20^{\circ}\text{W}$  à  $60^{\circ}\text{E}$  en longitude, et de  $10^{\circ}\text{S}$  à  $60^{\circ}\text{N}$  en latitude, avec une résolution de 20 km. (MEDD02-Web)

# B. Déploiement de CHIMERE et d'ORCHIDEE

## B.1. Choix du serveur

Au LMD, CHIMERE est développé et testé sur un serveur dédié de l'École Polytechnique : le serveur *Chimster*. Ce serveur est administré localement et accessible sur demande à toute personne du LMD. Ce serveur offre un point d'accès aux serveurs de données hébergés par le LMD, et permet de lancer des simulations sur différents nœuds de calcul.

ORCHIDEE a été intégré au modèle RegIPSL, un modèle de climat régional appliqué à la Méditerranée (Pennel *et al.*, 2018; Polcher *et al.*, 2018). Ce modèle vise à coupler les modèles WRF, ORCHIDEE, NEMO et CHIMERE, au moyen du coupleur OASIS. Le couplage via OASIS de WRF et ORCHIDEE est opérationnel. Le couplage via OASIS de ORCHIDEE et NEMO est en cours d'implémentation.

RegIPSL est notamment développé et testé sur un serveur de calcul de l'IPSL : le serveur *ClimServ*. Ce serveur offre aux chercheurs de l'IPSL un accès combiné vers des moyens de calcul et un grand nombre de jeux de données utiles aux études climatiques. Ce serveur est accessible sur demande aux contributeurs des projets de l'IPSL.

A terme, CHIMERE sera également intégré au modèle RegIPSL. RegIPSL étant déjà en cours de déploiement sur *ClimServ*, j'ai donc choisi d'utiliser *ClimServ* pour le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE.

## B.2. Déploiement de CHIMERE

J'ai choisi pour CHIMERE la version de développement actuelle, incluant le code du couplage de CHIMERE et de WRF. Cette version n'est pas distribuée publiquement pour le moment.

La compilation de CHIMERE est configurée en fonction du cluster de calcul utilisé. Pour déployer CHIMERE sur ClimServ, j'ai donc réutilisé et adapté les fichiers de configuration du déploiement de CHIMERE sur le TGCC (Très Grand Centre de Calcul) Curie du CEA, car l'environnement logiciel de ClimServ est proche de celui du TGCC Curie.

### **B.3. Déploiement d'ORCHIDEE**

J'ai choisi la version d'ORCHIDEE intégrée au modèle RegIPSL.

Cette version d'ORCHIDEE inclut l'interface d'ORCHIDEE avec OASIS. De plus, le code du modèle RegIPSL (dont fait partie cette version d'ORCHIDEE) inclut également le code des couplages d'ORCHIDEE avec WRF, et d'ORCHIDEE avec NEMO.

Cette version est une version de développement, et elle n'est pas téléchargeable publiquement.

### **B.4. Débogage et remonté des anomalies**

La version d'ORCHIDEE utilisée dans le modèle RegIPSL correspond à une version de développement. Elle n'inclut donc pas les dernières corrections faites dans la version officielle.

ORCHIDEE est principalement utilisé et testé sur les serveurs *curie/TGCC*, *ada/IDRIS* et *obelix/LSCE*. ORCHIDEE est moins utilisé et donc aussi moins testé sur le serveur ClimServ.

J'ai donc rencontré quelques bugs au cours de l'utilisation du modèle. J'ai contribué à la correction de ces bugs en identifiant et localisant l'origine des erreurs, et en les transmettant aux développeurs du modèle.

#### **Branches non fusionnées**

Certains bugs avaient déjà été corrigés dans d'autres versions du modèle, mais les corrections n'avaient pas été intégrées à la version que j'utilisais. Pour corriger ces bugs, il a donc suffi d'intégrer ces corrections à ma version.

#### **Droits d'accès aux données sur ClimServ**

Certaines données étaient copiées en lectures seules sur ClimServ, ce qui provoquait une erreur lorsque RegIPSL tentait de les mettre à jour. Ce problème n'était

pas apparu sur les autres serveurs de calcul où RegIPSL était déjà déployé, car chaque serveur gère les droits d'accès d'une façon qui lui est propre. La solution pour remédier à ce problème a donc consisté à ne pas copier ces fichiers lors de l'initialisation de RegIPSL.

### **Variables d'environnement**

Les bibliothèques logicielles installées sur ClimServ ont des versions différentes de celles installées sur les serveurs où RegIPSL est déjà déployé; il a donc fallu renseigner pour les variables d'environnement des valeurs adaptées à ClimServ.

### **Valeurs aux limites non gérées**

Dans certains cas d'utilisation, des paramètres peuvent prendre des valeurs inhabituelles. Ces valeurs peuvent par exemple être anormalement grandes. Si ces paramètres sont utilisés comme exposants dans des formules mathématiques, des valeurs trop grandes peuvent alors provoquer un dépassement mémoire, c'est-à-dire générer un nombre ne pouvant être stocké dans la mémoire. Or, les divisions par un dépassement mémoire sont gérées en Fortran différemment selon les options de compilation. Par exemple, si le programme est compilé en mode *Release* (optimisé, donc plus rapide), le résultat de la division d'un nombre par un dépassement mémoire est considéré égal à zéro. Par contre, si le programme est compilé en mode *Debug* (non optimisé, mais permettant d'obtenir des traces d'exécution plus détaillées), cette même division provoque une erreur et l'arrêt du programme. Cette différence de comportement selon le mode de compilation rend ce type d'erreurs difficile à localiser. En essayant de lancer une simulation à partir de mes jeux de données, j'ai identifié une formule mathématique dans ORCHIDEE dans laquelle les valeurs aux limites ne sont pas correctement gérées. Ce code fonctionne normalement en mode *Release*, mais provoque un plantage en mode *Debug*. Ne maîtrisant pas suffisamment les paramètres du modèle, j'ai donc fait remonter le problème aux développeurs du modèle. La résolution de ce problème permettra d'utiliser ORCHIDEE en mode *Debug* avec des jeux de données présentant ces valeurs aux limites. Le mode *Debug* est très pratique pour localiser les erreurs à l'exécution du modèle.

# C. Préparation des données de forçage météos

Cette annexe décrit les traitements appliqués aux données météos générées par le couplage WRF-ORCHIDEE pour les rendre compatibles avec CHIMERE.

## C.1. Dimensions manquantes

Le tableau suivant (C.1) liste les dimensions qui manquaient dans les données générées par le couplage WRF-ORCHIDEE, et qu'il a donc été nécessaire de créer lors de la préparation des données de forçage météos pour CHIMERE.

## C.2. Variables manquantes

Le tableau C.2 liste les variables qui manquaient dans les données générées par le couplage WRF-ORCHIDEE, et qu'il a donc été nécessaire de créer lors de la préparation des données de forçage météos pour CHIMERE.

<b>Dimension manquante</b>	<b>Description</b>	<b>Équivalent WRF-ORCHIDEE</b>	<b>Traitement réalisé</b>
<i>DateStrLen</i>	Longueur des chaînes de caractères représentant les dates (égale à 19)	Aucun	Création d'une dimension <i>DateStrLen</i> de taille 19
<i>Time</i>	Nombre de dates	<i>time_counter</i>	Création d'une dimension <i>Time</i> de même taille que <i>time_counter</i>
<i>bottom_top</i>	Nombre de divisions verticales	<i>ZNU</i>	Création d'une dimension <i>bottom_top</i> de même taille que <i>ZNU</i>
<i>bottom_top_stag</i>	Nombre de divisions verticales étalées	<i>ZNW</i>	Création d'une dimension <i>bottom_top_stag</i> de même taille que <i>ZNW</i>
<i>south_north</i>	Nombre de divisions méridionales	<i>y</i>	Création d'une dimension <i>south_north</i> de même taille que <i>y</i>
<i>south_north_stag</i>	Nombre de divisions méridionales étalées	<i>y_grid_V</i>	Création d'une dimension <i>south_north_stag</i> de même taille que <i>y_grid_V</i>
<i>west_east</i>	Nombre de divisions zonales	<i>x</i>	Création d'une dimension <i>west_east</i> de même taille que <i>x</i>
<i>west_east_stag</i>	Nombre de divisions zonales étalées	<i>x_grid_U</i>	Création d'une dimension <i>west_east_stag</i> de même taille que <i>x_grid_U</i>

**Table C.1.** – Liste des dimensions manquantes et traitements réalisés pour créer ces dimensions lors de la préparation des données de forçage météos pour CHIMERE.

<b>Variable manquante</b>	<b>Description</b>	<b>Équivalent WRF-ORCHIDEE</b>	<b>Traitement réalisé</b>
<i>P_TOP</i>	Pression dans la couche la plus haute du modèle	Aucun	Création d'une variable <i>P_TOP</i> =5000 Pa.
<i>Times</i>	Date sous forme de chaîne de caractères (par exemple : 2013-01-14_18:00:00)	<i>time_counter</i> (compteur à partir du 1er décembre 1949 minuit)	Conversion des <i>time_counter</i> en <i>Times</i> (voir 4.2.2.2)
<i>XLAT</i>	Latitude en degrés-nord	<i>nav_lat</i>	Création d'une variable <i>XLAT</i> identique à <i>nav_lat</i>
<i>XLAT_U</i>	Latitude en degrés-nord étalée en X	<i>nav_lat_grid_U</i>	Création d'une variable <i>XLAT_U</i> identique à <i>nav_lat_grid_U</i>
<i>XLAT_V</i>	Latitude en degrés-nord étalée en Y	<i>nav_lat_grid_V</i>	Création d'une variable <i>XLAT_V</i> identique à <i>nav_lat_grid_V</i>
<i>XLONG</i>	Longitude en degrés-est	<i>nav_lon</i>	Création d'une variable <i>XLONG</i> identique à <i>nav_lon</i>
<i>XLONG_U</i>	Longitude en degrés-est étalée en X	<i>nav_lon_grid_U</i>	Création d'une variable <i>XLONG_U</i> identique à <i>nav_lon_grid_U</i>
<i>XLONG_V</i>	Longitude en degrés-est étalée en Y	<i>nav_lon_grid_V</i>	Création d'une variable <i>XLONG_V</i> identique à <i>nav_lon_grid_V</i>

**Table C.2.** – Liste des variables manquantes et traitements réalisés pour créer ces variables lors de la préparation des données de forçage météos pour CHIMERE.

## **D. Types de végétations représentés dans les modèles et mise en correspondance**

### **D.1. Types de végétations représentés dans le modèle CHIMERE**

Le tableau D.1 indique les types de végétations représentés dans le modèle CHIMERE.

### **D.2. Types de végétations représentés dans le modèle ORCHIDEE**

Le tableau D.2 indique les types de végétations représentés dans le modèle ORCHIDEE. Ces types de végétations correspondent aux 13 PFT utilisés pour décrire la surface terrestre dans ORCHIDEE.

### **D.3. Mise en correspondance**

Dans le nouveau module *vegetation\_effects* de CHIMERE, j'ai associé les types de végétation des modèles de la façon suivante :

- les types *10, 11, 12, 13, 14, 15* et *16* de CHIMERE sont associés au type *1* d'ORCHIDEE,
- le type *9* de CHIMERE est associé à la moyenne des types *10* et *11* d'ORCHIDEE,



Indice	Type de végétation
1	Forêts de conifères tempérées et boréales
2	Forêts d'arbres caduques tempérées et boréales
3	Forêts de conifères méditerranéennes
4	Forêts d'arbres feuillus méditerranéennes
5	Cultures tempérées
6	Cultures méditerranéennes
7	Cultures racines
8	Végétations semi-naturelles et tourbières
9	Prairies
10	Scrubs méditerranéens
11	Zones humides
12	Toundra
13	Désert
14	Eau
15	Glace
16	Urbain

**Table D.1.** – Types de végétations représentés dans le modèle CHIMERE. (Simpson, 2003)

Indice	Type de végétation
1	Sol nu
2	Tropical persistant à feuilles larges
3	Tropical caduque à feuilles larges
4	Tempéré persistant à aiguilles
5	Tempéré persistant à feuilles larges
6	Tempéré caduque à feuilles larges
7	Boréal persistant à aiguilles
8	Boréal caduque à feuilles larges
9	Boréal caduque à aiguilles
10	Prairie en C3
11	Prairie en C4
12	Culture en C3
13	Culture en C4

**Table D.2.** – Types de végétations représentés dans le modèle ORCHIDEE. (Krin-  
ner *et al.*, 2005)

- les 5, 6 et 7 de CHIMERE sont associés à la moyenne des types 12 et 13 d'ORCHIDEE,
- et les types 1, 2, 3, 4, 8, de CHIMERE sont associés à la moyenne des types 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 et 9 d'ORCHIDEE.

# E. Réception et envoi des données échangées

## E.1. CHIMERE

Le nouveau module *vegetation\_effects* de CHIMERE permet à CHIMERE d'envoyer, de recevoir et d'agréger les variables du couplage CHIMERE-ORCHIDEE.

### E.1.1. Réception de la conductance stomatique et du LAI

Dans le module *vegetation\_effects*, la subroutine *receive\_orchidee\_gsmean\_and\_lai* permet la réception et l'agrégation de la conductance stomatique et du LAI calculés et envoyés par ORCHIDEE. L'algorithme est le suivant :

- A chaque pas de temps, ORCHIDEE envoie, via son interface OASIS, les tableaux 1D linéarisés `SND_GSMEAN_1`, `SND_GSMEAN_2`, ..., `SND_GSMEAN_13`, et `SND_LAI_1`, `SND_LAI_2`, ..., `SND_LAI_13`. Ces tableaux contiennent chacun ( $n_{zonal} \times n_{merid}$ ) éléments ( $n_{zonal}$  est le nombre de divisions en longitude, et  $n_{merid}$  le nombre de divisions en latitude).
- Ces tableaux sont reçus par CHIMERE, via son interface CHISIS, dans des tableaux 1D linéarisés `RCV_GSMEAN_1`, `RCV_GSMEAN_2`, ..., `RCV_GSMEAN_13`, ou `RCV_LAI_1`, `RCV_LAI_2`, ..., `RCV_LAI_13`.
- A chaque réception d'un tableau 1D, la subroutine *receive\_orchidee\_gsmean\_and\_lai* :
  - restructure le tableau 1D reçu en tableau 2D de taille ( $n_{zonal}$ ,  $n_{merid}$ ),
  - et remplit les éléments (1: $n_{zonal}$ , 1: $n_{merid}$ ,  $ju$ ) d'un tableau 3D temporaire de taille ( $n_{zonal}$ ,  $n_{merid}$ ,  $ju$ ), où  $ju$  est le type de végétation d'ORCHIDEE auquel la conductance (ou le LAI) reçu se rapporte (nombre entre 1 et 13).
- Une fois les tableaux temporaires remplis, c'est-à-dire une fois que la conductance (ou le LAI) associée à chacun des types de végétation d'ORCHIDEE a

bien été reçue, alors on agrège les conductances (ou les LAI) de ce tableau en associant les types de végétation d'ORCHIDEE aux types de végétation de CHIMERE (voir D.3).

On obtient finalement des tableaux 3D contenant la conductance et le LAI pour chacun des 16 types de végétation de CHIMERE.

### E.1.2. Envoi des concentrations d'ozone de surface

La subroutine *send\_O3\_to\_orchidee* de CHIMERE envoie à ORCHIDEE les concentrations d'ozone de surface calculées par CHIMERE.

A chaque pas de temps, CHIMERE stocke les concentrations des espèces chimiques qu'il simule dans un tableau 4D, *conc*, de taille (*nspec*, *nzonal*, *nmerid*, *nverti*), où *nspec* est le nombre d'espèces chimiques simulées, *nzonal* est la dimension ouest-est, *nmerid* est la dimension sud-nord, et *nverti* est le nombre de couche verticales (du bas vers le haut).

Les concentrations d'ozone de surface sont donc dans le sous-tableau *conc(iO3 ,:,:,1)*, où *iO3* désigne l'indice de l'espèce O<sub>3</sub> dans le code de CHIMERE. Les dimensions de ce sous tableau représentent les indices en longitude et en latitude de la maille.

La subroutine *send\_O3\_to\_orchidee* extrait donc ces concentrations d'O<sub>3</sub> à chaque pas de temps, et les envoie sous forme d'un tableau 1D linéarisé à ORCHIDEE, via l'interface OASIS CHISIS.

## E.2. ORCHIDEE

### E.2.1. Choix du driver pour les forçages atmosphériques

ORCHIDEE est un modèle qui doit être piloté par des données atmosphériques. Dans le cadre de ce couplage, j'ai choisi, pour simplifier l'implémentation et réduire les temps de calcul, que ces données seraient lues à partir de données de forçage.

ORCHIDEE peut lire ces données de forçage de deux façons différentes.

La première solution consiste à utiliser un driver OASIS, tel que le driver *driver2oasis\_land*, qui lit les données de forçage et les transmet ensuite à ORCHIDEE. Cette solution a déjà été mise en œuvre et validée pour le couplage NEMO-ORCHIDEE. Elle ne nécessite donc pas le développement de nouveau module. Par contre, cette solution augmente les temps de calcul car il est plus long de lire les

données via OASIS que directement depuis un fichier NetCDF. De plus, cette solution complexifie le fichier *namcouple* avec des champs qui ne sont pas échangés entre CHIMERE et ORCHIDEE, ce qui entraîne une perte de lisibilité.

L'autre solution consiste à lire les données de forçage au moyen d'un driver qui n'utilise pas OASIS. Cette solution est la plus efficace au niveau temps de calcul car OASIS n'échange que les champs participant réellement au couplage CHIMERE-ORCHIDEE. Elle est également plus lisible car le fichier *namcouple* ne contient que les champs participant au couplage. Par contre, cette solution n'est pas celle utilisée pour le couplage de NEMO et d'ORCHIDEE.

J'ai finalement choisi de lire les données de forçage au moyen d'un driver OASIS, car cette méthode a déjà été validée pour le couplage NEMO-ORCHIDEE, et elle sera donc plus rapide à mettre en œuvre.

### E.2.2. Choix du module de couplage

J'ai ensuite du choisir une interface OASIS parmi celles existantes dans ORCHIDEE. Ces interfaces permettent notamment le couplage d'ORCHIDEE avec WRF, ou d'ORCHIDEE avec NEMO.

Dans le couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE que l'on souhaite implémenter, ORCHIDEE est forcé par des données météos pré-calculées par WRF. C'est ce qui a déjà été fait pour le couplage d'ORCHIDEE avec NEMO.

J'ai donc choisi de réutiliser l'interface OASIS développée pour le couplage d'ORCHIDEE et de NEMO. Cette interface correspond dans le code au programme *orchideeoasis*. Ce programme utilise également le module *orchoasis\_tools*.

### E.2.3. Interface ORCHIDEE-OASIS

Dans le programme *orchideeoasis*, j'ai d'abord déclaré et alloué les variables globales permettant de stocker les variables échangées entre CHIMERE et ORCHIDEE. Ces variables sont les tableaux *o3surf* (tableau 1D linéarisé, concentrations d'ozone en molécules  $\text{cm}^{-3}$ ), *gsmean* (tableau 2D, conductance stomatique pour le  $\text{CO}_2$  en  $\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) et *lai* (tableau 2D, LAI en  $\text{m}^2 \text{m}^{-2}$ ). La dimension de *o3surf* et la 1ère dimension de *gsmean* et de *lai* représentent les indices linéarisés des coordonnées (longitude et latitude) de la maille. La 2nde dimension de *gsmean* et de *lai* représente l'indice du type de végétation (types de végétation pris en charge par ORCHIDEE).

A chaque pas de temps de la simulation, le programme *orchideeoasis* récupère les concentrations d'O<sub>3</sub> de surface envoyées par CHIMERE via OASIS, par appel à la subroutine *orchoasis\_getvar* du module *orchoasis\_tools*. Puis, il appelle la subroutine principale du module *sechiba*, *sechiba\_main*, en lui passant notamment en argument les concentrations d'ozone de surface (*o3surf*) calculées par CHIMERE (c'est le module *sechiba* qui calcule la conductance stomatique *gsmean* et le LAI *lai*). Ensuite, le programme envoie la conductance stomatique et le LAI calculés à CHIMERE via OASIS, par appel à la subroutine *orchoasis\_putvar* du module *orchoasis\_tools*. Enfin, le programme désalloue les tableaux *o3surf*, *gsmean* et *lai*.

Le module *orchoasis\_tools* déclare les identifiants des variables à échanger via OASIS (*gsmean*, *lai* et *o3surf* du programme *orchideeoasis*). Un de ces identifiants est associé au tableau des concentrations d'ozone (*o3surf*). Pour la conductance stomatique et le LAI, j'ai utilisé un tableau par type de végétation. ORCHIDEE étant décrit par 13 types de végétation, ORCHIDEE envoie donc 13 tableaux pour les conductances stomatiques, et 13 tableaux pour les LAI. On doit donc déclarer 13 identifiants OASIS pour les tableaux de conductances stomatiques, et 13 identifiants OASIS pour les tableaux de LAI.

Toujours dans le module *orchoasis\_tools*, la subroutine *orchoasis\_defvar* permet de définir les variables OASIS du couplage CHIMERE-ORCHIDEE, par appels à la subroutine *oasis\_def\_var* de la bibliothèque OASIS. La subroutine *oasis\_def\_var* associe les variables OASIS aux identifiants définis précédemment au niveau global. La subroutine *orchoasis\_getvar* permet de récupérer les concentrations d'O<sub>3</sub> envoyées par CHIMERE, par appel à la subroutine *oasis\_get* de la bibliothèque OASIS. Enfin, la subroutine *orchoasis\_putvar* permet l'envoi des conductances stomatiques (*gsmean*) et des LAI (*lai*) calculées par ORCHIDEE à CHIMERE, par appel à la subroutine *oasis\_put* de la bibliothèque OASIS.

# F. Calcul de l'impact de l'ozone sur la végétation

L'impact de l'ozone sur la PPB et la conductance stomatique est calculé par la subroutine *diffuco\_trans\_co2* du module *diffuco* d'ORCHIDEE, d'après les paramétrisations d'Anav *et al.* (2011, 2012) et de Felzer *et al.* (2002).

## F.1. Impact de l'ozone sur la PPB

Pour chaque point du domaine où la photosynthèse est calculée et pour chaque type de végétation, ORCHIDEE calcule la conductance stomatique moyenne pour le CO<sub>2</sub>,  $g_{sto,CO_2}$ .

On calcule d'abord, à partir de  $g_{sto,CO_2}$ , la conductance stomatique moyenne pour le H<sub>2</sub>O ( $g_{sto,H_2O}$ , en mol m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>) :

$$g_{sto,H_2O} = g_{sto,CO_2} \times \frac{D_{H_2O}}{D_{CO_2}}$$

avec  $D_{H_2O}$  et  $D_{CO_2}$  les rapports de diffusivité de la vapeur d'eau et du CO<sub>2</sub> (en m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>).  $D_{H_2O}/D_{CO_2} = 1.6$  pour des conditions normales de température et de pression.

Puis on calcule la densité en nombre de l'air ( $n_{air}$ , en molécules cm<sup>-3</sup>) :

$$n_{air} = \rho_{air} \times 10^6 \times \frac{N_A}{\bar{M}_{air}}$$

avec  $\rho_{air}$  la densité volumique de l'air (en kg m<sup>-3</sup>),  $N_A = 6.0221367 \times 10^{23}$  mol<sup>-1</sup>, et  $\bar{M}_{air} = 28.964 \times 10^{-3}$  kg mol<sup>-1</sup> le poids moléculaire de l'air sec.

$n_{air}$  nous permet alors de convertir la concentration d'ozone à la surface calculée et envoyée par CHIMERE ( $[O_3]_{surf}$ , en molécules cm<sup>-3</sup>) en concentration d'ozone en



ppb ( $[O_3]_{surf,ppb}$ ) :

$$[O_3]_{surf,ppb} = [O_3]_{surf} \times \frac{10^9}{n_{air}}$$

On calcule ensuite la concentration d'ozone à la surface dépassant le seuil de 40 ppb ( $[O_3]_{surf,40ppb}$ ) :

$$[O_3]_{surf,over40ppb} = [O_3]_{surf,ppb} - 40$$

Si  $[O_3]_{surf,over40ppb}$  est positive, on met alors à jour l' $AOT_{40}$  (en ppb h) :

$$AOT_{40} = AOT_{40} + [O_3]_{surf,over40ppb}$$

On calcule ensuite les impacts instantané ( $I_{O_3,inst}$ ), mensuel ( $I_{O_3,month}$ ) et réel ( $I_{O_3}$ ) de l'ozone sur la végétation (voir équations 2.2, 2.3 et 2.4), et enfin la PPB impactée par l'ozone ( $PPB_{O_3}$ , voir équation 2.5).

ORCHIDEE utilise ensuite  $PPB_{O_3}$  pour calculer le LAI qu'il envoie à CHIMERE.

## F.2. Impact de l'ozone sur la conductance stomatique

Pour calculer l'impact de l'ozone sur la conductance stomatique, on utilise la relation de Felzer *et al.* (2002) (voir équation 2.7). Cette relation permet d'obtenir une nouvelle valeur de la conductance stomatique pour le  $H_2O$  ( $g_{sto,H_2O}$ ), tenant compte cette fois de l'effet de l'ozone sur la photosynthèse.

Il ne reste alors plus qu'à convertir la nouvelle valeur de  $g_{sto,H_2O}$  en conductance pour le  $CO_2$  ( $g_{sto,CO_2}$ , en  $mol\ m^{-2}\ s^{-1}$ ) :

$$g_{sto,CO_2} = g_{sto,H_2O} \times \frac{D_{CO_2}}{D_{H_2O}}$$

avec  $D_{CO_2}$  et  $D_{H_2O}$  les rapports de diffusivité du  $CO_2$  et de la vapeur d'eau (en  $m^2\ s^{-1}$ ).  $D_{CO_2}/D_{H_2O} = 0.625$  pour des conditions normales de température et de pression.

C'est cette conductance stomatique,  $g_{sto,CO_2}$ , qu'ORCHIDEE envoie ensuite à CHIMERE.

## G. Piste pour réduire les temps de calcul

La grille du domaine utilisée (A) a une résolution élevée, ce qui peut entraîner des temps de simulation assez longs.

Pour réduire les temps de simulation, notamment lors du test de nouvelles paramétrisations ou de nouveaux couplages, il serait donc préférable d'utiliser un sous-domaine de moindre résolution.

L'opération d'extraction d'un sous-domaine peut normalement être réalisée à l'aide de l'outil en ligne de commande *ncks*, inclus dans la boîte à outils NCO (NCO-Web).

# Liste des symboles

## Liste des abréviations

AOT40 Accumulated exposure Over a Threshold of 40 ppb

CERFACS Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

CLA Couche Limite Atmosphérique

CLP Couche Limite Planétaire

COV Composé organique volatil

CSV Comma Separated Value (valeur séparée une virgule)

ESM Earth System Model (modèle système terre)

INERIS Institut National de l'Environnement industriel et des RISques

LAI Leaf Area Index (Indice de surface foliaire)

LGGE Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement

LISA Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques

LMD Laboratoire de Météorologie Dynamique

LSCE Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement

LSODA Livermore Solver for Ordinary Differential Equations

MEGAN Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature

MPI Message Passing Interface

NetCDF Network Common Data Form

OASIS Ocean Atmosphere Sea Ice Soil

PAR Rayonnement Photosynthétique Actif

PFT Plant Functional Type (type fonctionnel de plante)  
PM Particle Matters (particules fines)  
PNG Portable Network Graphics  
POD Phyto-toxic Ozone Dose  
PPB Production Primaire Brute  
ppb part per billion (partie par milliard)  
SECHIBA Schématisation des ÉChanges Hydriques à l'Interface Biosphère-Atmosphère  
STOMATE Saclay Toulouse Orsay Modèle pour l'Analyse des Ecosystèmes Terrestres  
TGCC Très Grand Centre de Calcul  
WRF Weather Research and Forecasting

### **Glossaire**

AOT40 L'AOT40 (ou Accumulated exposure Over a Threshold of 40 ppb) est l'exposition cumulée d'ozone dépassant le seuil de 40 ppb durant une saison de croissance. (d'après Castell et Thiec, 2017)

Biomasse Masse de matière vivante ou organique, généralement exprimée en poids sec par unité de surface. (d'après Krinner et al., 2005)

Calcul distribué Mise à contribution des ressources inutilisées d'un grand nombre d'ordinateurs que l'on relie en réseau, le plus souvent par Internet, dans le but d'effectuer des traitements de données complexes et volumineux, liés à l'exécution d'une tâche. (d'après Coulouris et al., 2005)

Composé organique volatil Composé organique nuisible, à base de carbone, qui se trouve sous forme gazeuse ou vaporeuse dans l'atmosphère et qui intervient notamment dans le processus de formation d'ozone. (d'après Guenther et al., 2006)

Conductance stomatique Mesure (habituellement en  $\text{mmol m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) du taux de passage du dioxyde de carbone ( $\text{CO}_2$ ) entrant, ou de la vapeur d'eau sortant des stomates d'une feuille. (d'après Jarvis, 1976)

Couche de mélange Couche de l'atmosphère instable, en contact direct avec la surface, mélangée par la convection ou par la turbulence due au frottement ou par leur effet combiné. (d'après Jacob, 1999)

Couche limite atmosphérique Couche atmosphérique adjacente à la surface de la Terre, affectée par la friction contre cette surface limite et, probablement aussi, par le transfert de chaleur et d'autres variables à travers cette surface. La partie inférieure (correspondant à une dizaine de mètres d'épaisseur) de la couche limite, où la génération mécanique de turbulences est la plus forte, est appelée couche limite de surface ou couche de surface. (d'après WMO, 2011)

Couche limite planétaire Couche la plus basse de l'atmosphère au sein de laquelle les conditions météorologiques sont influencées de manière significative par la surface de la Terre. Cette couche s'étend généralement de la base de l'atmosphère jusqu'à 1500 m de hauteur. (d'après WMO, 2011)

Couplage offline Exécution de plusieurs modèles sans rétroaction. (d'après Briant et al., 2017)

Couplage online Exécution de plusieurs modèles avec rétroaction(s). (d'après Briant et al., 2017)

Cycle du carbone Cycle biochimique naturel d'absorption, de transformation et de libération du carbone dans l'atmosphère, l'écorce terrestre et l'eau par l'intermédiaire des organismes vivants. (d'après Jacob, 1999)

Densité en nombre Nombre de molécules d'une espèce gazeuse donné par unité de volume d'air. (d'après Jacob, 1999)

Durée de vie Durée pendant laquelle une espèce chimique peut survivre sans réagir, se photolyser ou se dissocier. Les produits chimiques hautement réactifs ont une durée de vie courte. (d'après Jacob, 1999)

Embruns marins Ensemble de gouttelettes d'eau arrachées par le vent à la crête des vagues, et emportées à faible distance dans l'atmosphère. (d'après Organisation météorologique mondiale, 2011)

Emissions anthropiques Emissions d'espèces chimiques dans l'atmosphère provenant de l'activité humaine, telles que la combustion de combustibles fossiles. (d'après Jacob, 1999)

- Emissions biogéniques Emission d'espèces chimiques dans l'atmosphère provenant des fonctions naturelles des organismes biologiques, telles que la photosynthèse de l'oxygène. (d'après Jacob, 1999)
- Equation de continuité Équation exprimant la conservation de la masse en mouvement, par exemple de l'écoulement de l'eau. (d'après Jacob, 1999)
- Etat stationnaire Une espèce chimique est à l'état stationnaire si son taux de réaction et sa durée de vie restent à peu près constants pendant une période beaucoup plus longue que sa durée de vie. (d'après Jacob, 1999)
- Généricité Abstraction permettant d'obtenir des algorithmes pouvant être combinés à différentes représentations de données pour produire une grande variété de logiciels utiles. (d'après Musser et Stepanov, 1988)
- Indice de surface foliaire Rapport entre la surface foliaire totale d'une plante et la surface du sol couverte par son feuillage. (d'après Anav et al., 2011)
- Indice de vérification Indice établi en comparant la précision d'un ensemble de prévisions avec celle d'un ensemble correspondant obtenu par une méthode déterminée, comme la prévision au hasard, la prévision fondée sur la persistance ou la prévision climatologique. (d'après Anav et al., 2011)
- Interblocage Situation qui provoque un blocage complet du système et qui se produit lorsque deux programmes tentent d'avoir accès à une même ressource simultanément, ou lorsque l'un d'entre eux attend une information que seul l'autre peut lui fournir, mais est temporairement dans l'impossibilité de le faire. (d'après Craig et al., 2017)
- Interopérabilité Capacité de différents systèmes d'information à communiquer, échanger des données et utiliser les informations qui ont été échangées (d'après HIMSS, 2013)
- Modèle Système Terre Modèle climatique couplé permettant de modéliser explicitement le mouvement du carbone à travers le système terrestre. Ces modèles simulent la physique et la biogéochimie de la terre. (d'après Drobinski et al., 2012)
- Namcouple Fichier de configuration du coupleur OASIS3-MCT. Contient les informations définies par l'utilisateur et nécessaires au lancement d'une simulation couplée avec OASIS. (d'après Valcke et al., 2013)

**Photolyse** Coupure d'une ou de plusieurs liaisons d'une entité moléculaire consécutive à une absorption de lumière. (d'après Jacob, 1999)

**PODy** Le PODy (ou Phyto-toxic Ozone Dose) est le flux d'ozone stomatique accumulé durant une saison de croissance et dépassant le seuil de  $y$  nmol O<sub>3</sub> m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>. Le seuil  $y$  dépend des végétaux et correspond au flux maximum que les végétaux sont capables de détoxifier instantanément. Ce seuil est compris entre 0 et 10 nmol O<sub>3</sub> m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>. (d'après Castell et Thiec, 2017)

**Production primaire brute** Quantité de carbone de l'atmosphère fixé par photosynthèse. (d'après Anav et al., 2011)

**Production primaire nette** Production primaire brute, moins la perte de carbone due à la respiration autotrophe, c.-à-d. la somme des processus métaboliques nécessaires à la croissance et la conservation des plantes, dans une zone donnée. (d'après WMO, 2011)

**Précurseurs de l'ozone** Polluants atmosphériques, tels que les oxydes d'azote, qui avec les hydrocarbures et de la lumière solaire, sont susceptibles de produire des concentrations nocives d'ozone. (d'après Jacob, 1999)

**Respiration de croissance** Respiration des plantes permettant la synthèse de nouvelle biomasse. (d'après Amthor, 1984)

**Respiration de maintenance** Respiration des plantes permettant de maintenir les plantes en vie. (d'après Amthor, 1984)

**Réanalyse** Méthode d'analyse, pour l'atmosphère et l'océan, de la température, du vent, des courants et d'autres grandeurs météorologiques et océanographiques, fondée sur le traitement de paléodonnées météorologiques et océanographiques au moyen de variantes statiques des modèles les plus perfectionnés pour la prévision du temps et des dernières techniques d'assimilation des données. (d'après WMO, 2011)

**Subsidence** Lent affaissement d'une masse d'air sur une vaste région, généralement accompagné d'une divergence horizontale dans les couches inférieures. (WMO, 2011)

**Taux de renouvellement** Fraction d'une substance qui quitte un compartiment géophysique dans un intervalle de temps donné. Le taux de renouvellement est l'inverse du temps de résidence. (d'après Jacob, 1999)



Taux de réaction Dans une réaction chimique, vitesse à laquelle les réactifs sont transformés en produits.

(d'après Jacob, 1999)

Temps de résidence Durée moyenne pendant laquelle une substance reste dans un compartiment géophysique donné. Le temps de résidence dépend du flux de sortie et de la taille du compartiment. Le temps de résidence est l'inverse du taux de renouvellement. (d'après Jacob, 1999)

Troposphère Partie inférieure de l'atmosphère terrestre, qui s'étend de la surface jusqu'à une altitude allant d'environ 9 km aux pôles à environ 17 km à l'équateur, dans laquelle la température décroît assez régulièrement avec l'altitude. (d'après Jacob, 1999)

# Bibliographie

## Références bibliographiques

- J. D. ABER et C. A. FEDERER : A generalized, lumped-parameter model of photosynthesis, evapotranspiration and net primary production in temperate and boreal forest ecosystems. *Oecologia*, 92(4):463–474, déc. 1992. ISSN 0029-8549, 1432-1939. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00317837>.
- M. D. ABRAMS, J. C. SCHULTZ et K. W. KLEINER : Ecophysiological Responses in Mesic versus Xeric Hardwood Species to an Early-Season Drought in Central Pennsylvania. *Forest Science*, 36(4):970–981, déc. 1990.
- J. S. AMTHOR : The role of maintenance respiration in plant growth. *Plant, Cell & Environment*, 7(8):561–569, nov. 1984. ISSN 1365-3040. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/1365-3040.ep11591833>.
- J. S. AMTHOR, D. S. GILL et F. H. BORMANN : Autumnal leaf conductance and apparent photosynthesis by saplings and sprouts in a recently disturbed northern hardwood forest. *Oecologia*, 84(1):93–98, août 1990. ISSN 0029-8549, 1432-1939. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00665600>.
- A. ANAV, L. MENUT, D. KHVOROSTYANOV et N. VIOVY : Impact of tropospheric ozone on the Euro-Mediterranean vegetation. *Global Change Biology*, 17(7):2342–2359, juil. 2011. ISSN 1365-2486. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1365-2486.2010.02387.x/abstract>.
- A. ANAV, L. MENUT, D. KHVOROSTYANOV et N. VIOVY : A comparison of two canopy conductance parameterizations to quantify the interactions between surface ozone and vegetation over Europe. *J. Geophys. Res.*, 117(G3):G03027, sept. 2012. ISSN 2156-2202. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1029/2012JG001976/abstract>.
- A. T. ARCHIBALD, M. E. JENKIN et D. E. SHALLCROSS : An isoprene mechanism intercomparison. *Atmospheric Environment*, 44(40):5356–5364, déc. 2010. ISSN 1352-2310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S135223100900781X>.
- R. R. AUBUCHON, D. R. THOMPSON et T. M. HINCKLEY : Environmental influences on photosynthesis within the crown of a white oak. *Oecologia*, 35(3):295–306, jan. 1978. ISSN 0029-8549, 1432-1939. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00345138>.

- J. T. BALL, I. E. WOODROW et J. A. BERRY : A Model Predicting Stomatal Conductance and its Contribution to the Control of Photosynthesis under Different Environmental Conditions. *In Progress in Photosynthesis Research*, p. 221–224. Springer, Dordrecht, 1987. ISBN 978-94-017-0521-9 978-94-017-0519-6. URL [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-017-0519-6\\_48](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-017-0519-6_48).
- M. BISSON, QUÉBEC (PROVINCE), DIRECTION DU MILIEU ATMOSPHÉRIQUE, QUÉBEC (PROVINCE) et SERVICE DE LA QUALITÉ DE L'ATMOSPHÈRE : *La qualité de l'air au Québec de 1975 à 1994*. Le Ministère, Québec, 1997. ISBN 978-2-550-31669-5. OCLC : 428014181.
- C. BLOSS, V. WAGNER, M. E. JENKIN, R. VOLKAMER, W. J. BLOSS, J. D. LEE, D. E. HEARD, K. WIRTZ, M. MARTIN-REVIEJO, G. REA, J. C. WENGER et M. J. PILLING : Development of a detailed chemical mechanism (MCMv3.1) for the atmospheric oxidation of aromatic hydrocarbons. *Atmos. Chem. Phys.*, 5(3):641–664, mars 2005. ISSN 1680-7324. URL <https://www.atmos-chem-phys.net/5/641/2005/>.
- R. BRIANT, P. TUCCELLA, A. DEROUBAIX, D. KHVOROSTYANOV, L. MENUT, S. MAILLER et S. TURQUETY : Aerosol-radiation interaction modelling using online coupling between the WRF 3.7.1 meteorological model and the CHIMERE 2016 chemistry-transport model, through the OASIS3-MCT coupler. *Geosci. Model Dev.*, 10(2):927–944, fév. 2017. ISSN 1991-9603. URL <https://www.geosci-model-dev.net/10/927/2017/>.
- J.-F. CASTELL et D. L. THIEC : Impacts de l'ozone sur l'agriculture et les forêts et estimation des coûts économiques, mai 2017. URL <http://lodel.irevues.inist.fr/pollution-atmospherique/index.php?id=5690>.
- J. COATES et T. M. BUTLER : A comparison of chemical mechanisms using tagged ozone production potential (TOPP) analysis. *Atmos. Chem. Phys.*, 15(15):8795–8808, août 2015. ISSN 1680-7324. URL <https://www.atmos-chem-phys.net/15/8795/2015/>.
- G. F. COULOURIS, J. DOLLIMORE et T. KINDBERG : *Distributed systems : concepts and design*. pearson education, 2005.
- A. CRAIG, S. VALCKE et L. COQUART : Development and performance of a new version of the OASIS coupler, OASIS3-MCT\_3. 0. *Geoscientific Model Development*, 10(9):3297, 2017.
- P. DE ROSNAY et J. POLCHER : Modelling root water uptake in a complex land surface scheme coupled to a GCM. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 2(2/3):239–255, 1998. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00330830>.
- P. DROBINSKI, A. ANAV, C. LEBEAUPIN BROSSIER, G. SAMSON, M. STÉFANON, S. BASTIN, M. BAKLOUTI, K. BÉRANGER, J. BEUVIER, R. BOURDALLÉ-BADIE, L. COQUART, F. D'ANDREA, N. de NOBLET-DUCOUDRÉ, F. DIAZ, J.-C. DUTAY, C. ETHE, M.-A. FOUJOLS, D. KHVOROSTYANOV, G. MADEC, M. MANCIP, S. MASSON, L. MENUT, J. PALMIERI, J. POLCHER, S. TURQUETY, S. VALCKE et N. VIOVY : Model of the Regional Coupled Earth system (MORCE) : Application to process and climate studies in vulnerable regions. *Environmental*

*Modelling & Software*, 35:1–18, juil. 2012. ISSN 1364-8152. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815212000357>.

- N. I. DUCOUDRÉ, K. LAVAL et A. PERRIER : SECHIBA, a New Set of Parameterizations of the Hydrologic Exchanges at the Land-Atmosphere Interface within the LMD Atmospheric General Circulation Model. *J. Climate*, 6(2):248–273, fév. 1993. ISSN 0894-8755. URL <https://journals.ametsoc.org/doi/abs/10.1175/1520-0442%281993%29006%3C0248%3ASANSOP%3E2.0.CO%3B2>.
- J.-L. DUFRESNE, M.-A. FOUJOLS, S. DENVIL, A. CAUBEL, O. MARTI, O. AUMONT, Y. BALKANSKI, S. BEKKI, H. BELLENGER, R. BENSHILA, S. BONY, L. BOPP, P. BRACONNOT, P. BROCKMANN, P. CADULE, F. CHERUY, F. CODRON, A. COZIC, D. CUGNET, N. d. NOBLET, J.-P. DUVEL, C. ETHÉ, L. FAIRHEAD, T. FICHEFET, S. FLAVONI, P. FRIEDLINGSTEIN, J.-Y. GRANDPEIX, L. GUEZ, E. GUILYARDI, D. HAUGLUSTAINE, F. HOURDIN, A. IDELKADI, J. GHATTAS, S. JOUSSAUME, M. KAGEYAMA, G. KRINNER, S. LABETOULLE, A. LAHELLEC, M.-P. LEFEBVRE, F. LEFEVRE, C. LEVY, Z. X. LI, J. LLOYD, F. LOTT, G. MADEC, M. MANCIP, M. MARCHAND, S. MASSON, Y. MEURDESOLF, J. MIGNOT, I. MUSAT, S. PAROUTY, J. POLCHER, C. RIO, M. SCHULZ, D. SWINGEDOUW, S. SZOPA, C. TALANDIER, P. TERRAY, N. VIOVY et N. VUICHARD : Climate change projections using the IPSL-CM5 Earth System Model : from CMIP3 to CMIP5. *Clim Dyn*, 40(9-10):2123–2165, mai 2013. ISSN 0930-7575, 1432-0894. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s00382-012-1636-1>.
- K. M. EMMERSON et M. J. EVANS : Comparison of tropospheric gas-phase chemistry schemes for use within global models. *Atmos. Chem. Phys.*, 9(5):1831–1845, mars 2009. ISSN 1680-7324. URL <https://www.atmos-chem-phys.net/9/1831/2009/>.
- G. D. FARQUHAR, S. v. CAEMMERER et J. A. BERRY : A biochemical model of photosynthetic CO<sub>2</sub> assimilation in leaves of C<sub>3</sub> species. *Planta*, 149(1):78–90, juin 1980. ISSN 0032-0935, 1432-2048. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00386231>.
- B. FELZER, D. KICKLIGHTER, J. MELILLO, C. WANG, Q. ZHUANG et R. PRINN : Effects of ozone on net primary production and carbon sequestration in the conterminous United States using a biogeochemistry model. *Tellus B*, 56(3):230–248, juil. 2004. ISSN 1600-0889. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1600-0889.2004.00097.x/abstract>.
- B. S. FELZER, D. W. KICKLIGHTER, J. M. MELILLO, C. WANG, Q. ZHUANG et R. G. PRINN : Ozone effects on net primary production and carbon sequestration in the conterminous United States using a biogeochemistry model. nov. 2002. URL <http://dspace.mit.edu/handle/1721.1/3554>.
- B. J. FINLAYSON-PITTS : The Tropospheric Chemistry of Sea Salt : A Molecular-Level View of the Chemistry of NaCl and NaBr. *Chem. Rev.*, 103(12):4801–4822, déc. 2003. ISSN 0009-2665. URL <https://doi.org/10.1021/cr020653t>.

- GIORGETTA MARCO A., JUNGCLAUS JOHANN, REICK CHRISTIAN H., LEGUTKE STEPHANIE, BADER JÜRGEN, BÖTTINGER MICHAEL, BROVKIN VICTOR, CRUEGER TRAUTE, ESCH MONIKA, FIEG KERSTIN, GLUSHAK KSENIA, GAYLER VERONIKA, HAAK HELMUTH, HOLLWEG HEINZ-DIETER, ILYINA TATIANA, KINNE STEFAN, KORNBLUEH LUIS, MATEI DANIELA, MAURITSEN THORSTEN, MIKOLAJEWICZ UWE, MUELLER WOLFGANG, NOTZ DIRK, PITHAN FELIX, RADDATZ THOMAS, RAST SEBASTIAN, REDLER RENE, ROECKNER ERICH, SCHMIDT HAUKE, SCHNUR REINER, SEGSCHNEIDER JOACHIM, SIX KATHARINA D., STOCKHAUSE MARTINA, TIMMRECK CLAUDIA, WEGNER JÖRG, WIDMANN HEINRICH, WIENERS KARL-H., CLAUSSEN MARTIN, MAROTZKE JOCHEM et STEVENS BJORN : Climate and carbon cycle changes from 1850 to 2100 in MPI-ESM simulations for the Coupled Model Intercomparison Project phase 5. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 5(3):572–597, juin 2013. ISSN 1942-2466. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/jame.20038>.
- A. GUENTHER, T. KARL, P. HARLEY, C. WIEDINMYER, P. I. PALMER et C. GERON : Estimates of global terrestrial isoprene emissions using MEGAN (Model of Emissions of Gases and Aerosols from Nature). *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6(11):3181–3210, août 2006. URL <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295995>.
- A. GUENTHER, C. N. HEWITT, D. ERICKSON, R. FALL, C. GERON, T. GRAEDEL, P. HARLEY, L. KLINGER, M. LERDAU et W. A. MCKAY : A global model of natural volatile organic compound emissions. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 100(D5):8873–8892, 1995.
- V. P. GUTSCHICK et T. SIMONNEAU : Modelling stomatal conductance of field-grown sunflower under varying soil water content and leaf environment : comparison of three models of stomatal response to leaf environment and coupling with an abscisic acid-based model of stomatal response to soil drying. *Plant, Cell & Environment*, 25(11):1423–1434, nov. 2002. ISSN 1365-3040. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1046/j.1365-3040.2002.00937.x>.
- HIMSS : *HIMSS Dictionary of Healthcare Information Technology Terms, Acronyms and Organizations, Third Edition*. HIMSS, 2013. ISBN 978-1-938904-29-5. Google-Books-ID : AEowB-QAAQBAJ.
- T. M. HINCKLEY, R. G. ASLIN, R. R. AUBUCHON, C. L. METCALF et J. E. ROBERTS : Leaf Conductance and Photosynthesis in Four Species of the Oak-Hickory Forest Type. *Forest Science*, 24(1):73–84, mars 1978.
- A. C. HINDMARSH : ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers. *Scientific computing*, p. 55–64, 1983.
- F. HOURDIN, I. MUSAT, S. BONY, P. BRACONNOT, F. CODRON, J.-L. DUFRESNE, L. FAIRHEAD, M.-A. FILIBERTI, P. FRIEDLINGSTEIN, J.-Y. GRANDPEIX, G. KRINNER, P. LEVAN, Z.-X. LI et F. LOTT : The LMDZ4 general circulation model : climate performance and sensitivity to parametrized physics with emphasis on tropical convection. *Clim Dyn*, 27(7-8):787–813, déc. 2006. ISSN 0930-7575, 1432-0894. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s00382-006-0158-0>.

- P. HUMBLLOT, D. LECONTE-DEMARSY, P. CLERINO, S. SZOPA, J.-F. CASTELL et P.-A. JAYET : Assessment of ozone impacts on farming systems : A bio-economic modeling approach applied to the widely diverse French case. *Ecological Economics*, 85:50–58, jan. 2013. ISSN 0921-8009. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921800912004181>.
- D. JACOB : *Introduction to atmospheric chemistry*. Princeton University Press, 1999.
- P. G. JARVIS : The interpretation of the variations in leaf water potential and stomatal conductance found in canopies in the field. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B*, 273(927):593–610, fév. 1976. ISSN 0080-4622, 2054-0280. URL <http://rstb.royalsocietypublishing.org/content/273/927/593>.
- E. JONES, T. OLIPHANT et P. PETERSON : SciPy : Open source scientific tools for Python, 2014. URL : <http://www.scipy.org>, 4, 2014.
- JUNGCLAUS J. H., FISCHER N., HAAK H., LOHMANN K., MAROTZKE J., MATEI D., MIKOLAJEWICZ U., NOTZ D. et STORCH J. S. : Characteristics of the ocean simulations in the Max Planck Institute Ocean Model (MPIOM) the ocean component of the MPI-Earth system model. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 5(2):422–446, mars 2013. ISSN 1942-2466. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/jame.20023>.
- C. KNOTE, P. TUCELLA, G. CURCI, L. EMMONS, J. J. ORLANDO, S. MADRONICH, R. BARÓ, P. JIMÉNEZ-GUERRERO, D. LUECKEN, C. HOGREFE, R. FORKEL, J. WERHAHN, M. HIRTL, J. L. PÉREZ, R. SAN JOSÉ, L. GIORDANO, D. BRUNNER, K. YAHYA et Y. ZHANG : Influence of the choice of gas-phase mechanism on predictions of key gaseous pollutants during the AQMEII phase-2 intercomparison. *Atmospheric Environment*, 115:553–568, août 2015. ISSN 1352-2310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231014009388>.
- G. KRINNER, N. VIOVY, N. de NOBLET-DUCOUDRÉ, J. OGÉE, J. POLCHER, P. FRIEDLINGSTEIN, P. CIAIS, S. SITCH et I. C. PRENTICE : A dynamic global vegetation model for studies of the coupled atmosphere-biosphere system. *Global Biogeochem. Cycles*, 19(1):GB1015, mars 2005. ISSN 1944-9224. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1029/2003GB002199/abstract>.
- D. KUHLMAN : A Python Book : Beginning Python, Advanced Python, and Python Exercises. p. 278, 2013.
- J. LATHIERE, D. A. HAUGLUSTAINE, A. D. FRIEND, N. DE NOBLET-DUCOUDRÉ, N. VIOVY et G. A. FOLBERTH : Impact of climate variability and land use changes on global biogenic volatile organic compound emissions. *Atmos. Chem. Phys.*, 6(8):2129–2146, juin 2006. ISSN 1680-7324. URL <https://www.atmos-chem-phys.net/6/2129/2006/>.
- A. LE MORVAN-QUÉMÉNER, I. COLL, J. KAMMER, E. LAMAUD, B. LOUBET, E. PERSONNE et P. STELLA : Impact of parameterization choices on the restitution of ozone deposition over vegetation. *Atmospheric Environment*, 178:49–65, avr. 2018. ISSN 1352-2310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231018300098>.

- S. MAILLER, L. MENUT, D. KHVOROSTYANOV, M. VALARI, F. COUVIDAT, G. SIOUR, S. TURQUETY, R. BRIANT, P. TUCCELLA et B. BESSAGNET : CHIMERE 2017 : from urban to hemispheric chemistry-transport modeling. *Geoscientific Model Development*, 10(6):2397, 2017.
- B. MARGARETE, K. ANDREA, G. DORTJE et D. KARL-JOSEF : Oxidative stress and ozone : perception, signalling and response. *Plant, Cell & Environment*, 28(8):1012–1020, août 2005. ISSN 1365-3040. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-3040.2005.01326.x>.
- L. MENUT, B. BESSAGNET, D. KHVOROSTYANOV, M. BEEKMANN, N. BLOND, A. COLETTE, I. COLL, G. CURCI, G. FORET, A. HODZIC, S. MAILLER, F. MELEUX, J.-L. MONGE, I. PISON, G. SIOUR, S. TURQUETY, M. VALARI, R. VAUTARD et M. G. VIVANCO : CHIMERE 2013 : a model for regional atmospheric composition modelling. *Geoscientific Model Development*, 6(4):981–1028, 2013. URL <https://hal-ineris.archives-ouvertes.fr/ineris-00961818/document>.
- P. MESSINA, J. LATHIÈRE, K. SINDELAROVA, N. VUICHARD, C. GRANIER, J. GHATTAS, A. COZIC et D. A. HAUGLUSTAINE : Global biogenic volatile organic compound emissions in the ORCHIDEE and MEGAN models and sensitivity to key parameters. *Atmos. Chem. Phys.*, 16(22):14169–14202, nov. 2016. ISSN 1680-7324. URL <https://www.atmos-chem-phys.net/16/14169/2016/>.
- G. MILLS, H. PLEIJEL, S. BRAUN, P. BÜKER, V. BERMEJO, E. CALVO, H. DANIELSSON, L. EMBERSON, I. G. FERNÁNDEZ, L. GRÜNHAGE, H. HARMENS, F. HAYES, P.-E. KARLSSON et D. SIMPSON : New stomatal flux-based critical levels for ozone effects on vegetation. *Atmospheric Environment*, 45(28):5064–5068, sept. 2011. ISSN 1352-2310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231011006029>.
- D. R. MUSSER et A. A. STEPANOV : Generic programming. In *Symbolic and Algebraic Computation*, Lecture Notes in Computer Science, p. 13–25. Springer, Berlin, Heidelberg, juil. 1988. ISBN 978-3-540-51084-0 978-3-540-46153-1. URL [https://link.springer.com/chapter/10.1007/3-540-51084-2\\_2](https://link.springer.com/chapter/10.1007/3-540-51084-2_2).
- S. V. OLLINGER, J. D. ABER et P. B. REICH : Simulating Ozone Effects on Forest Productivity : Interactions Among Leaf-, Canopy-, and Stand-Level Processes. *Ecological Applications*, 7(4):1237–1251, nov. 1997. ISSN 1939-5582. URL [http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1890/1051-0761\(1997\)007\[1237:S0E0FP\]2.0.CO;2/abstract](http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1890/1051-0761(1997)007[1237:S0E0FP]2.0.CO;2/abstract).
- S. J. OLTMANS, A. S. LEFOHN, J. M. HARRIS, I. GALBALLY, H. E. SCHEEL, G. BODEKER, E. BRUNKE, H. CLAUDE, D. TARASICK, B. J. JOHNSON, P. SIMMONDS, D. SHADWICK, K. ANLAUF, K. HAYDEN, F. SCHMIDLIN, T. FUJIMOTO, K. AKAGI, C. MEYER, S. NICHOL, J. DAVIES, A. REDONDAS et E. CUEVAS : Long-term changes in tropospheric ozone. *Atmospheric Environment*, 40(17):3156–3173, juin 2006. ISSN 1352-2310. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231006001233>.

- R. PENNEL, J. POLCHER, T. ARSOUZE, L. MENUT, S. MAILLER, S. TURQUETY, M. VALARI, T. DUBOS, S. BASTIN, P. DROBINSKI et L. FITA : The IPSL Regional Earth System Model (RegIPSL) : structure and development. p. 32, 2018.
- A. PETROFF, A. MAILLIAT, M. AMIELH et F. ANSELMET : Aerosol dry deposition on vegetative canopies. Part I : review of present knowledge. *Atmospheric Environment*, 42(16):3625–3653, 2008.
- J. POLCHER, T. ARSOUZE, S. BASTIN, T. DUBOS, L. FITA, L. MENUT, S. MAILLER, R. PENNEL, S. TURQUETY et M. VALARI : Strategic planning for the Regional Modelling at IPSL : 2020-2025. p. 10, 2018.
- J. POLCHER, B. McAVANEY, P. VITERBO, M. A. GAERTNER, A. HAHMANN, J. F. MAHFOUF, J. NOILHAN, T. PHILLIPS, A. PITMAN, C. A. SCHLOSSER, J. P. SCHULZ, B. TIMBAL, D. VERSEGHY et Y. XUE : A proposal for a general interface between land surface schemes and general circulation models. *Global and Planetary Change*, 19(1-4), déc. 1998. ISSN 0921-8181. URL <http://escholarship.org/uc/item/4g5366n8>.
- P. B. REICH : Quantifying plant response to ozone : a unifying theory. *Tree Physiol*, 3(1):63–91, mars 1987. ISSN 0829-318X. URL <https://academic.oup.com/treephys/article/3/1/63/1687002>.
- A. SALA et J. D. TENHUNEN : Simulations of canopy net photosynthesis and transpiration in *Quercus ilex* L. under the influence of seasonal drought. *Agricultural and Forest Meteorology*, 78(3):203–222, fév. 1996. ISSN 0168-1923. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168192395022503>.
- R. SANDER, A. BAUMGAERTNER, S. GROMOV, H. HARDER, P. JÖCKEL, A. KERKWEIG, D. KUBISTIN, E. REGELIN, H. RIEDE, A. SANDU, D. TARABORRELLI, H. TOST et Z.-Q. XIE : The atmospheric chemistry box model CAABA/MECCA-3.0. *Geoscientific Model Development*, 4:373–380, mai 2011. URL <http://www.geosci-model-dev.net/4/373/2011/>.
- D. SIMPSON : *Transboundary acidification, eutrophication and ground level ozone in Europe : Unified EMEP model description*. Meteorologisk institutt, 2003.
- S. SITCH, B. SMITH, I. C. PRENTICE, A. ARNETH, A. BONDEAU, W. CRAMER, J. O. KAPLAN, S. LEVIS, W. LUCHT, M. T. SYKES, K. THONICKE et S. VENEVSKY : Evaluation of ecosystem dynamics, plant geography and terrestrial carbon cycling in the LPJ dynamic global vegetation model. *Global Change Biology*, 9(2):161–185, fév. 2003. ISSN 1365-2486. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1046/j.1365-2486.2003.00569.x>.
- W. C. SKAMAROCK, J. KLEMP, J. DUDHIA, D. O. GILL, D. M. BARKER, W. WANG et J. G. POWERS : A Description of the Advanced Research WRF Version 2. NCAR Technical Note, NCAR/TN-468+STR. Mesoscale and Microscale Meteorology Division. jan. 2005. URL <https://www.scienceopen.com/document?vid=7a37a7af-aa4b-4068-8d2f-254a51d36695>.



- A. STERL, R. BINTANJA, L. BRODEAU, E. GLEESON, T. KOENIGK, T. SCHMITH, T. SEMMLER, C. SEVERIJNS, K. WYSER et S. YANG : A look at the ocean in the EC-Earth climate model. *Clim Dyn*, 39(11):2631–2657, déc. 2012. ISSN 0930-7575, 1432-0894. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s00382-011-1239-2>.
- STEVENS BJORN, GIORGETTA MARCO, ESCH MONIKA, MAURITSEN THORSTEN, CRUEGER TRAUTE, RAST SEBASTIAN, SALZMANN MARC, SCHMIDT HAUKE, BADER JÜRGEN, BLOCK KAROLINE, BROKOPF RENATE, FAST IRINA, KINNE STEFAN, KORNBLUEH LUIS, LOHMANN ULRIKE, PINCUS ROBERT, REICHLER THOMAS et ROECKNER ERICH : Atmospheric component of the MPI-M Earth System Model : ECHAM6. *Journal of Advances in Modeling Earth Systems*, 5(2):146–172, jan. 2013. ISSN 1942-2466. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/jame.20015>.
- S. VALCKE, T. CRAIG et L. COQUART : OASIS3-MCT User Guide, OASIS3-MCT 2.0. *CER-FACS/CNRS SUC URA*, (1875), 2013.
- A. VOLDOIRE, E. SANCHEZ-GOMEZ, D. S. y. MÉLIA, B. DECHARME, C. CASSOU, S. SÉNÉSI, S. VALCKE, I. BEAU, A. ALIAS, M. CHEVALIER, M. DÉQUÉ, J. DESHAYES, H. DOUVILLE, E. FERNANDEZ, G. MADEC, E. MAISONNAVE, M.-P. MOINE, S. PLANTON, D. SAINT-MARTIN, S. SZOPA, S. TYTECA, R. ALKAMA, S. BELAMARI, A. BRAUN, L. COQUART et F. CHAUVIN : The CNRM-CM5.1 global climate model : description and basic evaluation. *Clim Dyn*, 40(9-10):2091–2121, mai 2013. ISSN 0930-7575, 1432-0894. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s00382-011-1259-y>.
- A. VRANKOVÁ et M. PALKO : Atmospheric Boundary Layer, 2016. URL <https://www.scientific.net/AMM.820.338>.
- D. A. WEINSTEIN, L. J. SAMUELSON et M. A. ARTHUR : Comparison of the response of red oak (*Quercus rubra*) seedlings and mature trees to ozone exposure using simulation modeling. *Environmental Pollution*, 102(2):307–320, août 1998. ISSN 0269-7491. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0269749198000499>.
- M. L. WESELY : Parameterization of surface resistances to gaseous dry deposition in regional-scale numerical models. *Atmospheric Environment (1967)*, 23(6):1293–1304, jan. 1989. ISSN 0004-6981. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0004698189901534>.
- V. E. WITTIG, E. A. AINSWORTH, S. L. NAIDU, D. F. KARNOSKY et S. P. LONG : Quantifying the impact of current and future tropospheric ozone on tree biomass, growth, physiology and biochemistry : a quantitative meta-analysis. *Global Change Biology*, 15(2):396–424, fév. 2009. ISSN 1365-2486. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1365-2486.2008.01774.x/abstract>.
- G. M. WOLFE, M. R. MARVIN, S. J. ROBERTS, K. R. TRAVIS et J. LIAO : The Framework for 0-D Atmospheric Modeling (F0am) v3. 1. *Geoscientific Model Development*, 9(9):3309, 2016.

D. C. WONG, J. PLEIM, R. MATHUR, F. BINKOWSKI, T. OTTE, R. GILLIAM, G. POULIOT, A. XIU, J. O. YOUNG et D. KANG : WRF-CMAQ two-way coupled system with aerosol feedback : software development and preliminary results. *Geosci. Model Dev.*, 5(2):299–312, mars 2012. ISSN 1991-9603. URL <https://www.geosci-model-dev.net/5/299/2012/>.

## Données bibliographiques issues d’Internet

AIRBASE-WEB : AirBase database. URL <http://acm.eionet.europa.eu/databases/airbase>.

J.-F. CASTELL : Impact de l’ozone sur une feuille de blé., 2009.

J.-F. CASTELL : Impact de l’ozone sur un champ de maïs., 2011.

CHIMERE-WEB : Chimere : A multi-scale chemistry-transport model for atmospheric composition analysis and forecast. URL <http://www.lmd.polytechnique.fr/chimere/>.

CLAND-WEB : L’Université Paris-Saclay obtient un Institut Convergence | Université Paris Saclay. URL <https://www.universite-paris-saclay.fr/fr/actualite/luniversite-paris-saclay-obtient-un-institut-convergence>.

CLIMSERV-WEB : ClimServ - Service de données et de calcul de l’IPSL. URL <http://climserv.ipsl.polytechnique.fr/>.

CNAM-WEB : Cnam - Formation - Diplôme d’ingénieur Spécialité informatique Modélisation et ingénierie mathématique. URL [http://formation.cnam.fr/rechercher-par-discipline/diplome-d-ingenieur-specialite-informatique-modelisation-et-ingenierie-mathematique-200647.kjsp?RH=newcat\\_themes](http://formation.cnam.fr/rechercher-par-discipline/diplome-d-ingenieur-specialite-informatique-modelisation-et-ingenierie-mathematique-200647.kjsp?RH=newcat_themes).

H. ECMWF-WEB : Accueil, mars 2014. URL <https://www.ecmwf.int/fr>.

ECOSYS-WEB : ECOSYS Bienvenue - Accueil. URL <https://www6.versailles-grignon.inra.fr/ecosys/>.

EMEP-WEB : EMEP - The European Monitoring and Evaluation Programme. URL <http://www.emep.int/>.

ESA-WEB : ESA CCI Land cover website. URL <https://www.esa-landcover-cci.org/>.

libIGCM WEB : testing\_libigcm\_to\_run\_regipsl [{{wiki :logo.png|logo du projet}} RegIPSL MED Wiki]. URL [https://sourcesup.renater.fr/wiki/morcemed/testing\\_libigcm\\_to\\_run\\_regipsl](https://sourcesup.renater.fr/wiki/morcemed/testing_libigcm_to_run_regipsl).

M1SGE-WEB : Master SGE - M1 SGE. URL <http://www.master-sge.com/fr/presentation/m1-sge>.

MEDCORDEX-WEB : Med-CORDEX - Mediterranean Coordinated Regional Downscaling Experiment. URL <https://www.medcordex.eu/>.

MEDD02-WEB : Domain configuration MED/D02. URL [https://sourcesup.renater.fr/wiki/morcemed/wrfconfig#domain\\_configurations](https://sourcesup.renater.fr/wiki/morcemed/wrfconfig#domain_configurations).

MM5-WEB : MM5 Community Model Homepage. URL <http://www2.mmm.ucar.edu/mm5/>.

NCO-WEB : Bienvenue sur le netCDF Operator (NCO) site. URL <http://nco.sourceforge.net/>.

N. NEMO-WEB : Welcome to the new NEMO website, jan. 2017. URL <https://www.nemo-ocean.eu/news/welcome-new-nemo-website/>.

OASIS-WEB : The OASIS Coupler - Welcome to the OASIS homepage. URL <https://portal.enes.org/oasis/>.

OUTILSIPSL-WEB : Tools developed by IPSL and IPSL partners. URL [http://forge.ipsl.jussieu.fr/igcmg\\_doc/wiki/DocJtools#libIGCM](http://forge.ipsl.jussieu.fr/igcmg_doc/wiki/DocJtools#libIGCM).

REGIPSL-WEB : Welcome to the RegIPSL MED Wiki. URL <https://sourcesup.renater.fr/wiki/morcemed/>.

TP-POLYTECHNIQUE-WEB : Résumé de MEC655c - Intro to atmospheric composition : processes, modelling, air quality (2017-2018). URL <https://moodle.polytechnique.fr/course/info.php?id=4747>.

TP-UPMC-WEB : Plan Pollution atmosphérique : processus et modélisation — Français. URL <http://master-oacos.lmd.jussieu.fr/fr/m2/plans-des-cours/plan-pollution-atmospherique-processus-et-modelisation/view>.

USDA-WEB : USDA Web Soil Survey - Home. URL <https://websoilsurvey.sc.egov.usda.gov/App/HomePage.htm>.

WMO : World Meteorological Organization, 2018. URL <https://public.wmo.int/en>.

WRF-USERGUIDE : WRF Users' Guide. URL [http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user\\_guide\\_v3/contents.html](http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/user_guide_v3/contents.html).

WRF-WEB : WRF Model Users Site. URL <http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/>.

XIOS-WEB : DocJtools – Igcmg\_doc. URL [http://forge.ipsl.jussieu.fr/igcmg\\_doc/wiki/DocJtools#XIOS](http://forge.ipsl.jussieu.fr/igcmg_doc/wiki/DocJtools#XIOS).

# Table des figures

1.1	Impact de l’ozone sur un champ de maïs (figure 1.1a, Castell, 2011) et sur une feuille de blé (figure 1.1b, Castell, 2009). . . . .	8
1.2	Schéma global du couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS sur le serveur ClimServ. Les données échangées via OASIS sont en rouge ( <i>LAI</i> : indice de surface foliaire, <i>Gsto</i> : conductance stomatique, <i>COVB</i> : émissions de COV biogéniques, <i>O3</i> : concentrations d’ozone). Les bulles en trait discontinu représentent les données de forçage. La bulle en trait plein ( <i>PPB</i> ) représente la production primaire brute calculée par ORCHIDEE. C’est cette <i>PPB</i> qui permet ensuite de calculer le rendement des cultures. . . . .	13
2.1	Modèle 0D pour une espèce atmosphérique X. (Jacob, 1999) . . . . .	16
2.2	Mécanisme chimique simplifié du système NO <sub>x</sub> /RH/O <sub>3</sub> . (M1SGE-Web) . . . . .	18
2.3	Diagramme de flux du couplage CHIMERE-ORCHIDEE. Les boîtes vertes représentent les modèles couplés. Les bulles bleues et orange représentent respectivement les variables échangées aux pas de temps horaire et journalier ( <i>Gsto</i> : conductance stomatique). CHIMERE et ORCHIDEE sont forcés par des données horaires calculées par le modèle WRF (boîte rouge). Anav <i>et al.</i> (2012) . . . . .	22
2.4	Résultats du couplage de CHIMERE et d’ORCHIDEE réalisé par Anav <i>et al.</i> (2012). La figure 2.4a représente la <i>PPB</i> annuelle (en gC m <sup>2</sup> année <sup>-1</sup> ) calculée par ORCHIDEE. La figure 2.4b montre l’indice de vérification obtenu en comparant la concentration quotidienne moyenne d’ozone calculée par CHIMERE aux observations des réseaux AIRBASE (AirBase-Web) et EMEP (EMEP-Web) pour 1389 stations au sol (1 : les concentrations calculées par CHIMERE sont identiques à celles mesurées; 0 : les concentrations calculées par CHIMERE sont très différentes de celles mesurées). (Anav <i>et al.</i> , 2012) . . . . .	27

3.1	Schéma conceptuel des compartiments géophysiques où se déroulent les interactions entre l’ozone troposphérique et la végétation. <i>PPFD</i> : densité de flux de photons photosynthétiques, $u^*$ : vitesse de frottement, $[CO_2]$ : concentration en $CO_2$ , $H_s$ : humidité relative, $[O_3]_0$ et $[O_3]$ : concentrations d’ $O_3$ initiale et courante, $R_a$ : résistance aérodynamique, $R_b$ : résistance quasi-laminaire, $R_c$ : résistance de surface, $v_d$ : vitesse de dépôt, $T_f$ : température des feuilles, <i>PFT</i> : type de plante fonctionnel, $A_n$ : photosynthèse nette, <i>LAI</i> : indice de surface foliaire, <i>PPB</i> : production primaire brute, $T_{surf}$ : température à la surface. . . . .	35
3.2	Évolution temporelle de l’épaisseur de la couche de mélange (en m). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	40
3.3	Évolution temporelle du coefficient de dilution dans la couche de mélange (en $h^{-1}$ ). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	41
3.4	Évolution temporelle des fréquences de photolyse (en $h^{-1}$ ) de l’ozone ( $O_3$ ) (3.4a) et du dioxyde d’azote ( $NO_2$ ) (3.4b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	42
3.5	Évolution temporelle des coefficients de dépôt (en $h^{-1}$ ) de l’ozone ( $O_3$ ) (3.5a) et du dioxyde d’azote ( $NO_2$ ) (3.5b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	44
3.6	Évolution temporelle des fractions d’émission (sans dimension) du matin (3.6a) et de l’après-midi (3.6b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	46
3.7	Évolution temporelle des flux d’émissions surfaciques (en molécules $cm^{-2} h^{-1}$ ) de $NO_x$ (3.7a) et de RH (3.7b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	47
3.8	Évolution temporelle des concentrations (en ppb) de OH (3.8a) et de $HO_2$ (3.8b). L’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24. Celui du bas indique le temps absolu. . . . .	53
3.9	Évolution temporelle des concentrations d’ $O_3$ (en ppb) calculées (figure 3.9a) et mesurées (figure 3.9b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.9a, l’axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.9b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées. . . . .	54

3.10	Évolution temporelle des concentrations de NO <sub>2</sub> (en ppb) calculées (figure 3.10a) et mesurées (figure 3.10b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.10a, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.10b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées. . . . .	54
3.11	Évolution temporelle des concentrations de NO (en ppb) calculées (figure 3.11a) et mesurées (figure 3.11b, M1SGE-Web). Sur la figure 3.11a, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas le temps absolu. Sur la figure 3.11b, les quatre courbes représentent respectivement les percentiles 5, 25, 75 et 95 calculés à partir des données mesurées. . . . .	55
3.12	Évolution temporelle des concentrations d'O <sub>3</sub> (en ppb) (figure 3.12a) et du rapport entre les concentrations de RH et de NOx (figure 3.12b) en conditions normales (courbe REF), et pour différents scénarios de canicule (C1 : $\bar{h} \times 2$ , C2 : $\tau \times 2$ , C3 : $v_a/2$ , C4 : $J_{\{O_3, NO_2\}} \times 2$ ). Sur les deux figures, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas indique le temps absolu. . . . .	56
3.13	Évolution temporelle des concentrations d'O <sub>3</sub> (en ppb) (figure 3.13a) et du rapport entre les concentrations de RH et de NOx (figure 3.13b) en conditions normales (courbe REF), et pour différents scénarios d'émissions (E1 : $\Phi_{\{NOx, RH\}}/2$ , E2 : $\Phi_{NOx}/2$ , E3 : $\Phi_{RH}/2$ ). Sur les deux figures, l'axe en abscisse du haut indique le temps modulo 24, et celui du bas indique le temps absolu. . . . .	57
4.1	Schéma de conception du couplage de CHIMERE et d'ORCHIDEE via OASIS. Le script <i>Run_CHIM_ORCH.sh</i> permet de lancer les modèles en parallèle. Ce script récupère les données de forçage (émissions anthropiques, météo, végétation, sol), les fichiers de configuration des modèles ( <i>chimere.par</i> et <i>run.def</i> ) et le fichier de configuration d'OASIS ( <i>namcouple</i> ), et les copie dans les répertoires d'exécution de chacun des modèles. Les interfaces <i>meteo-prepurf</i> et <i>driver2oasis_land</i> se chargent d'injecter les données de forçages météo dans les modèles. Les modèles échangent leurs données ( <i>LAI</i> , <i>Gsto</i> , <i>COVB</i> et <i>O3</i> ) au pas de temps horaire. Ces données, ainsi que les modules et fichiers impliqués dans le couplage via OASIS sont en rouge. Les modèles calculent à chaque pas de temps les concentrations d'ozone ( <i>O3</i> ) et la <i>PPB</i> impactée par l'ozone. . . . .	63

4.2	Concentrations d'O <sub>3</sub> à la surface (en ppb) simulées par le modèle CHIMERE non couplé, à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.2a représente la carte des concentrations calculées pour le 30 janvier 2013 à 16 h. La figure 4.2b représente l'évolution temporelle de la moyenne des concentrations d'ozone calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013. . . . .	78
4.3	Productivité primaire nette pour les cultures en C3 ( $PPN_{C3}$ , en gC jour <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup> ), simulée par le modèle ORCHIDEE non couplé à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.3a représente la carte des $PPN_{C3}$ calculées pour le 30 janvier 2013. La figure 4.3b représente l'évolution temporelle de la moyenne des $PPN_{C3}$ calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013. . . . .	80
4.4	Productivité primaire nette pour les cultures en C4 ( $PPN_{C4}$ , en gC jour <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup> ), simulée par le modèle ORCHIDEE non couplé à partir des données de forçage météo préparées. La figure 4.4a représente la carte des $PPN_{C4}$ calculées pour le 30 janvier 2013. La figure 4.4b représente l'évolution temporelle de la moyenne des $PPN_{C4}$ calculées sur tout le domaine au cours du mois de janvier 2013. . . . .	81
A.1	Projection de Lambert du domaine (rectangle jaune) utilisé pour le couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE. Ce domaine s'étend de -20 °W à 60 °E en longitude, et de 10 °S à 60 °N en latitude, avec une résolution de 20 km. (MEDD02-Web) . . . . .	88

# Liste des tableaux

2.1	Valeurs du coefficient $\alpha$ (en $mm^{-1} ppb^{-1}$ ) pour différents types de végétation (la référence propre à chaque coefficient est indiquée dans la troisième colonne du tableau). . . . .	24
3.1	Réactions chimiques prises en compte dans le modèle 0D et taux de réaction associés. Si la réaction ne dépend pas de l'intensité de la lumière, le taux de réaction est exprimé en $cm^3 \text{ molécule}^{-1} s^{-1}$ (réactions 1 à 4 et 7). Sinon, le taux de réaction correspond à une fréquence de photolyse et est exprimé en $s^{-1}$ (réactions 5 et 6). Les fréquences de photolyse correspondent aux fréquences maximales sur un cycle diurne. (Jacob, 1999 ; MISGE-Web) . . . . .	37
3.2	Paramètres des gaussiennes décrivant la distribution temporelle des émissions, pour le matin et l'après-midi. . . . .	45
3.3	Concentrations initiales et aux limites (en ppb) des espèces chimiques qui ne sont pas à l'EQS. D'après Jacob (1999) et MISGE-Web. . . . .	50
C.1	Liste des dimensions manquantes et traitements réalisés pour créer ces dimensions lors de la préparation des données de forçage météo pour CHIMERE. . . . .	93
C.2	Liste des variables manquantes et traitements réalisés pour créer ces variables lors de la préparation des données de forçage météo pour CHIMERE. . . . .	94
D.1	Types de végétations représentés dans le modèle CHIMERE. (Simpson, 2003) . . . . .	96
D.2	Types de végétations représentés dans le modèle ORCHIDEE. (Krinner <i>et al.</i> , 2005) . . . . .	97



# Couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE au moyen du coupleur OASIS pour l'étude de l'impact de l'ozone sur les grandes cultures.

Mémoire d'Ingénieur C.N.A.M., Paris 2018.

---

## RÉSUMÉ

Le couplage de modèles de chimie-transport 3D tel que CHIMERE et de la surface terrestre tel que ORCHIDEE est nécessaire pour mieux comprendre les interactions entre la chimie atmosphérique et la végétation.

Ces interactions sont complexes, surtout en trois dimensions. Un modèle 0D de la chimie de l'ozone troposphérique a donc d'abord été développé pour mieux comprendre les processus impliqués, et tester de nouvelles paramétrisations. Ce modèle permet de simuler la dynamique d'évolution des concentrations d'ozone à la surface dans un environnement de type urbain, notamment lors de scénarios de canicule et de contrôle des émissions.

Un couplage des modèles CHIMERE et ORCHIDEE a ensuite été implémenté, permettant aux modèles d'échanger au pas de temps horaire l'indice de surface foliaire (LAI), la conductance stomatique et les concentrations d'ozone de surface, via le coupleur OASIS.

Ce couplage a nécessité la construction de données de forçages météo, qui ont permis de réaliser des simulations avec les deux modèles (non-couplés) sur un même domaine et à partir du même jeu de données. Les résultats de ces simulations ont été concluants.

Ce couplage est en cours de finalisation et devrait notamment permettre, à terme, de quantifier l'impact de l'ozone sur le rendement des cultures.

**Mots clés : couplage, modèle, chimie, troposphère, végétation, ozone, forçage**

---

## SUMMARY

The coupling of 3D chemistry-transport models such as CHIMERE and terrestrial surface models such as ORCHIDEE is needed to better understand the interactions between atmospheric chemistry and vegetation.

These interactions are complex, especially in three dimensions. A 0D model of tropospheric ozone chemistry was therefore first developed to better understand the processes involved in these interactions, and to give us the possibility to test new parameterizations. This model simulates the dynamic of surface ozone concentrations in an urban-type environment, and was tested for heatwave and emission control scenarios.

A coupling of the CHIMERE and ORCHIDEE models was then implemented, allowing the models to exchange the leaf area index (LAI), the stomatal conductance and the surface ozone concentrations via the OASIS coupler at an hourly rate.

This coupling required the construction of weather forcing data, which permits us to run simulations with the two models (uncoupled) on the same spatial domain and period of time. The results of these simulations were conclusive.

This coupling is almost finalized, and will allow us soon to quantify the impact of ozone on crop yields.

**Key words: coupling, model, chemistry, troposphere, vegetation, ozone, forcing**