Chapitre 2

Compréhension des mécanismes de transport dans la couche limite atmosphérique

2.1 Préambule

La couche limite atmosphérique est caratérisée par une couche d'extension faible (1 km) par rapport à la structure verticale de l'ensemble de l'atmosphère (figure 2.1a). Elle posséde cependant des propriétés trés importantes pour la chimie de l'atmosphère :

- Le déplacement des masses d'air est toujours considéré comme turbulent alors que la turbulence est intermittente dans la troposphère libre (voir observations des radars en air clair)
- C'est le siège des échanges sol-atmosphère et ceux-ci sont quantifiables à partir des flux turbulents des paramètres considérés :
 - Le transfert de quantité de mouvement est une conséquence directe du freinage induit par la présence du sol
 - Le transfert de chaleur sensible est une conséquence du réchauffement diurne du sol
 - Les émissions de vapeur d'eau ou de polluants au niveau du sol impliquent un transfert de gaz ou de particules vers l'atmosphère
- La couche limite atmosphérique posséde en outre une structure interne complexe et présente une variabilité importante sur une cycle diurne (figure 2.1b)

2.2 Position des problémes

Quels sont les questions relatives à la dynamique de la couche limite atmosphérique qui vont intéresser les chimistes de l'atmosphère?

Prenons d'abord l'exemple de la variation de l'ozone observée au niveau du sol par des stations de surveillance de la pollution et simulée par des modèles de chimie-transport (voir Figure 2.2). Plusieurs remarques en découlent : la variablité des concentrations est importante même si on retrouve un cycle diurne moyen qui est du à la variation dirune de l'efficacité du cycle chimique suivant

$$NO_2 + h\nu(< 430nm) \longrightarrow NO + O^{^{3}P}$$
 (R.1)

$$O^{^{3}P} + O_2 + M \longrightarrow O_3 + M$$
 (R.2)

$$NO + RO_2 \longrightarrow NO_2 + RO$$
 (R.3)

- Les écarts modèles mesures sont souvent associés à une difficulté à bien representer les termes de transport dans la modélisation numérique (intensité, synchronisation avec les émissions)
- $-\frac{\partial n_{O_3}}{\partial t}$ ne dépend pas que des termes de production/destruction chimique $P_{O_3} L_{O_3}$ mais aussi du transport vertical induit par les flux turbulents (voir figure 2.3 décrivant l'estimation expérimentale de ce dernier terme comparé à $P_{O_3} - L_{O_3}$)

On conclut que la première question à laquelle on doit répondre sera de savoir comment déterminer des flux turbulents et leur variation avec l'altitude sachant qu'ils ne sont facilement mesurables directement qu'au niveau du sol. On devra donc les relier aux gradients verticaux des paramètres moyens décrivant l'écoulement. Ceci a été traité dans le chapitre 1 du cours

Considérons maintenant l'équation de conservation d'un constituant chimique C formé à partir des espéces A et B :

$$\frac{d[C]}{dt} = k[A][B] - k'[C] + \frac{v_d[C]}{h} + \frac{\overline{w'c'_s} - \overline{w'c'_h}}{h}$$
(2.1)

où [A] est proportionnel à $\frac{E_A t}{h}$ (E_A est le flux émis en mol.cm⁻².s⁻¹), h est la hauteur de couche limite, v_d la vitesse de déposition de C (pour O₃ $v_d \approx 1$ cm.s⁻¹). Le dernier terme représente la divergence du flux turbulent pour l'espèce C en supposant une variation linéaire du flux entre le sol et le sommet de la couche limite. On remarque que h intervient dans tous les termes et qu'il est donc trés important de déterminer correctement la hauteur de couche limite.

La seconde question à laquelle on doit répondre sera donc de savoir comment déterminer l'évolution temporelle de la hauteur de la couche limite

C'est ce qui va motiver cette 2eme partie du chapitre consacré à l'étude de la couche limite atmosphérique.

2.3 Evolution temporelle de la hauteur de couche limite

Nous avons vu dan sle préambule l'importance de la détermination de l'évolution temporelle de la hauteur de la couche limite. Rappelons que cette hauteur correspond à l'épaisseur de la couche mélangée où la température et le vent sont relativement constants avec l'altitude à la différence des couches plus minces qui la séparent du sol (couche de surface) et de la troposphère libre (zone d'entraînement) (Fig. 2.4). Les flux de chaleur sont généralement positifs et conséquents au voisinage du sol et deviennent nuls ou négatifs dans la zone d'entrainement. Pour une couche limite convective où la flottabilité domine la génération de turbulence par rapport à l'effet du cisaillement de vent, l'air circule assez librement entre la base et le sommet de la CM avec une échelle de temps convective t* de l'ordre de 10-20 min. En conséquence les forçages en surface (flux de chaleur, emission de polluant) sont communiqués assez rapidement au sommet de CM. Sa croissance sera également déterminée par la stabilité thermique au sommet de la CM, c'est à dire la structure de la zone d'entrainement. Nous verrons ainsi dans ce paragraphe une formulation simplifiée de la variation de la hauteur de la CM avec le flux de chaleur et la structure de la CM et ensuite nous détaillerons les informations que l'on peut déduire d'une étude de l'épaisseur de la zone d'entraînement.

2.3.1 Un modéle d'évolution de la hauteur de la couche limite

Puisque les profils verticaux sont peu variables sur l'ensemble de la couche limite convective, nous pouvons travailler sur des valeurs de θ et du vent moyennées sur la hauteur de la couche limite notée h. On considérera ainsi un modèle simplifié impliquant la température moyenne sur la CM notée $\langle \theta \rangle$, une discontinuité de température au sommet de la CM, notée $\Delta \theta$ et un flux de chaleur variant linéairement entre sa valeur au sol $\overline{\theta'w'}_s$ et sa valeur au sommet $\overline{\theta'w'}_h$. On introduit également la vitesse w_e avec laquelle la couche limite peut entrainer de l'air au sommet au cours de sa croissance. Cette vitesse est directement reliée au flux de chaleur au sommet et à la discontinuité de température, car l'entrainement est d'autant plus efficace que $\overline{\theta'w'}_h$ est grand et est freiné par l'amplitude de $\Delta \theta$. On peut donc écrire :

$$\overline{\theta'w'}_h = -w_e \Delta \theta_h \tag{2.2}$$

Par ailleurs l'équation de conservation de l'énergie introduite au chapitre 1 fait apparaitre l'évolution temporelle de θ :

$$\frac{d\theta}{dt} = \gamma_{\theta} \nabla^2 \theta - \frac{\partial \overline{\theta' w'}}{\partial z}$$

on peut écrire, en moyennant sur l'ensemble de CL et en négligeant la contribution de la conduction de chaleur par diffusion molédulaire par rapport à celle due à la diffusion turbulente on obtient :

$$h\frac{d<\theta>}{dt} = \overline{\theta'w'}_s - \overline{\theta'w'}_h \tag{2.3}$$

De même nous pouvons écrire l'équation de continuité appliquée à l'ensemble de la CM. Comme la densité est constante au 1er ordre dans la CM, la conservation de la masse équivaut à celle du volume et l'on peut écrire pour un volume de section A et de hauteur h, l'équation suivante :

$$A\frac{dh}{dt} = w_e A - < \int \int_A (\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}) dx dy >$$

Le 1er terme correspond à la croissance du volume par entrainement d'air de la troposphère libre au sommet de la CM par des processus non turbulent, ce processus est caractérisé par le paramètre w_e appelé vitesse d'entrainement. Le 2nd terme correspond à l'effet de la convergence horizontal de l'écoulement associé aux mouvements d'échelle synoptique, on peut caractériser cet effet par une vitesse verticale w_L associée à la convergence de grande échelle ($w_L < 0$ c'est à dire un mouvement subsident si il y a une divergence de l'écoulement synoptique). En présence de nuage cette équation peut être complétée par un terme tenant compte de la ventilation de la CM par l'ascendance associée à la convection nuageuse, ce terme dépend de la vitesse ascensionnelle dans le nuage w_c et de la fraction du ciel couverte par les nuages, f_c . On notera que w_L n'injecte pas d'air dans la CM car ce processus n'est contrôlé que par w_e et w_c . En effet w_L limitera simplement la vitesse d'évolution de la hauteur de la CM si il y a par exemple divergence de l'écoulement. On obtient finalement l'équation suivante pour la variation temporelle de h:

$$\frac{dh}{dt} = (1 - f_c)w_e - f_c w_c + w_L \tag{2.4}$$

Enfin on peut écrire l'équation d'évolution de la discontinuité de température au sommet. Celle-ci augmente si l'entrainement fait croître la CM puisque le gradient de température dans l'air plus stable de la troposphère libre $\Gamma \approx 5$ K/km est positif et diminue si la température moyenne de la CM augmente. D'où l'équation suivante :

$$\frac{d\Delta\theta_h}{dt} = \Gamma w_e - \frac{d < \theta >}{dt}$$
(2.5)

Les grandeurs Γ , w_L , $\overline{\theta'w'}_s$, sont supposées connues car elles correspondent à des forçages extérieurs déterminés par la connaissance de l'écoulement de grande échelle et des échanges thermiques avec le sol. Les inconnues seront donc : $h, <\theta >$, $\overline{\theta'w}_h, \Delta\theta_h$ et w_e . Comme on ne dispose que de 4 équations 2.4, 2.3, 2.5 et 2.2 pour déterminer l'évolution de h, on doit, comme on l'a fait précédemment pour déterminer les flux turbulents, introduire une équation supplémentaire qui correspond à une paramétrisation de l'effet d'entrainement au sommet de la CM. Plusieurs solutions sont utilisées :

- le modèle de "grignotage" où on suppose que la discontinuité de température au sommet n'existe plus et alors $\overline{\theta'w'}_h=0$.
- le cas de la convection libre où la production mécanique de turbulence ne joue aucun rôle dans le flux de chaleur au sommet de la CM et une paramétrisation impliquant uniquement le flux de chaleur en surface $\overline{\theta'w'}_s$, est suffisante.
- le cas de la convection forcée où l'on devra introduire un paramétrisation associant à la fois les flux de chaleur et les flux de moments, c'est à dire en utilisant l'équation de conservation de l'énergie cinétique turbulente.

Dans le modèle de grignotage, seul le chauffage en surface contribue à augmenter $\langle \theta \rangle$ et l'évolution de h est entièrement déterminée par les trois équations 2.4, 2.3 et 2.5 avec $\Delta \theta_h = 0$.

Pour la convection libre, le flux de chaleur au sommet peut être paramétrisé par une relation simple du type $\overline{\theta'w'}_h = -A_R \overline{\theta'w'}_s$ avec $0.1 < A_R < 0.3$. On obtient ainsi la paramé-

trisation suivante de la vitesse d'entraînement :

$$w_e = A_R \frac{\overline{\theta' w'_s}}{\Delta \theta_h} \tag{2.6}$$

On retrouve alors que l'entraînement est renforcé avec une augmentation du flux de chaleur en surface et limité par l'amplitude de la discontinuité de température au sommet.

Pour la convection forcée, on intègre, sur l'ensemble de la CM, l'équation de conservation de l'énergie cinétique turbulente $e_T : h < de_T/dt >= MP + B_P - B_N - Diss$, où MP est la production mécanique, B, les termes de production et perte d'énergie thermique dues à la flottabilité et $Diss=\int_0^h \epsilon dz$, le terme de dissipation. En utilisant les variations linéraires des flux de chaleur et de moment similaires à celles de la figure 2.4 et après intégration on pourra écrire :

$$MP = u_*^2 | \langle u \rangle | + \frac{1}{2} (\Delta u_h)^2 w_e = \frac{1}{\sqrt{C_D}} u_*^3 + \frac{1}{2} (\Delta u_h)^2 w_e$$

car les 2 sources d'énergie turbulente sont alors dues à la vitesse de frottement dans la CS et à la discontinuité de vitesse au sommet de la CM en posant par analogie avec l'équation 2.2 que $w_e = u_*^2/\Delta u_h$. On utilise aussi souvent le fait que rappelle u_* dépend du vent moyen dans la CM et du coefficient de frottement $C_D : u_*^2 \propto C_D | < u > |^2$.

$$B_P - B_N = \frac{1}{2}\beta h \overline{\theta'w'}_s + \frac{1}{2}\beta h \overline{\theta'w'}_h = \frac{1}{2}\beta h \overline{\theta'w'}_s - \frac{1}{2}\beta h w_e \Delta \theta_h$$
$$h < \frac{de_T}{dt} >= \int_0^h \frac{de_T}{dt} dz \approx A_T < e_T > w_e$$

qui représente l'évolution du stockage d'énergie à l'intérieur de la CM. Cette dernière est assez faible et peut être paramétrisée par une variation d'énergie due à l'entrainement.

Diss =
$$\frac{\alpha_1}{2}\beta h \overline{\theta' w'}_s + \alpha_2 u_*^3 + \frac{\alpha_3}{2} (\Delta u_h)^2 w_e$$

car on suppose dans ce modèle de la CM que la dissipation d'énergie à petite échelle doit être proportionnelle aux 3 sources principales le flux de chaleur en surface, le frottement à la surface et le flux de moment au sommet de la CM associé au gradient de vitesse Δu_h .

En introduisant une échelle de vitesse convective $\sigma_w^2 \propto 2 < e_T >$ qui traduit essentiellement les forçages de surface et leur propagation à l'ensemble de la CM :

$$\sigma_w^3 = \beta h \overline{\theta' w'}_s + \frac{A_S}{A_F} u_*^3$$

on peut alors en déduire une paramétrisation de la vitesse d'entrainement w_e :

$$w_e = \frac{dh}{dt} - w_L = \frac{A_F \sigma_w}{A_T + \frac{\beta h(\Delta \theta_h)}{\sigma_w^2} - A_P \frac{(\Delta u_h)^2}{\sigma_w^2}}$$
(2.7)

où les coefficients A_F , A_S , A_P dépendent respectivement de α_1 , α_2 , α_3 . Ces coefficients doivent être déterminés de façon empirique lors d'expériences de terrain. Pour la convection libre, le coefficient A_F tend vers $A_R \approx 0.2$. Pour les autres conditions, on prendra en général $A_F \approx 0.2$. Le coefficient A_S dépend de C_D et varie entre 2 et 10. Le coefficient A_P varie entre 0.5 et 1 et le coefficient A_T entre 0 et 2.

2.3.2 Une expérience de terrain pour determiner les coefficients d'une paramétrisation

Pour établir plus précisément les valeurs de A_F , A_S , A_P , A_T , une expérience a été organisée aux USA pour suivre l'évolution de la croissance de la hauteur de couche limite aux moyens de techniques lidar, d'un réseau de capteurs météorologiques en surface pour estimer la divergence de l'écoulement, d'une station pour établir les flux de surface $(u_* \text{ et } \overline{\theta' w'_s})$ et de radiosondages pour établir les discontinuités de température et vent en haut de la CM (voir Fig 2.5). Les courbes d'écarts entre hauteur h modélisée avec l'expression 2.7 et hauteur mesurée par le lidar (voir Fig. 2.6) permettent de déterminer, en supposant $A_F = 0.3$:

$$A_T = 0.75$$
 $A_S = 7.5$ $A_P = 1$

La condition $A_F = 0.3$ correspond à $\alpha_1 = 0.7$, c'est à dire 70% du flux de chaleur en surface dissipé par turbulence dans la CM. Celle $A_P = 1$ est peu réaliste car signifie que la génération de turbulence au sommet de la CM du fait du cisaillement n'est pas dissipée dans la CM($\alpha_3 = 0$). Les courbes 2.7 permettent pour différentes journées de comparer les évolutions mesurées avec un modèle simple correspondant à la convection libre (modèle de "grignotage") et avec le modèle utilisant la paramétrisation de w_e donnée par l'équation 2.7. On note :

- l'insuffisance du modèle de "grignotage" même si une croissance est bien reproduite
- la mauvaise reproduction du processus de production d'énergie par cisaillement de vent au sommet de la CM dans le modèle complet (surestimation de h le matin et sous-estimation l'après-midi)
- l'importance des inhomogénéités horizontales des flux de chaleur associées à la couverture nuageuse.

2.3.3 La couche d'entraînement

La zone d'entrainement est caractérisée par :

- une certaine stabilité thermique $\left(\frac{d\theta}{dz} > 0\right)$
- l'entrainement d'air depuis la troposphère libre
- la pénétration convective d'air transporté depuis la surface (ce qui assure en même temps la croissance de la CM) : les thermiques (voir Fig. 2.8)
- une région où le flux de chaleur $\overline{\theta' w'}_h$ devient négatif

L'épaisseur de la zone d'entrainement est définie comme la différence entre l'altitude h_{max} = altitude de pénétration maximum des thermiques et l'altitude h_{min} =altitude moyenne où le pour centage d'air de la troposphère libre devient < 10% (voir Fig. 2.8) . L'épaisseur Δh peut atteindre 40% de h lorsque dh/dt évolue rapidement. Cette épaisseur Δh dépend essentiellement de l'échelle de vitesse convective $\sigma_w \approx (\beta h \overline{\theta' w'}_s)^{1/3}$ et de la stabilité de l'air dans zone d'entrainement c'est à dire de $\Delta \theta_h$. On peut traduire cela à travers l'équation suivante :

$$\Delta h = ah + \frac{b\sigma_w^2}{\beta\Delta\theta_h} \quad \Rightarrow \quad \frac{\Delta h}{h} = a + \frac{b}{R_i^*} \tag{2.8}$$

où a et b sont à déterminer empiriquement et le nombre sans dimension R_i^* est appelé le nombre de Richardson convectif :

$$R_i^* = \frac{\beta h \Delta \theta_h}{\sigma_w^2} \approx \frac{\sigma_w}{w_e}$$

en utilisant l'équation 2.2. Des valeurs possibles pour a et b pour une CM convective bien développée seront par exemple : $a = 5.10^{-3}$ et b = 5.75.

2.4 Exemple d'étude de l'évolution de l'ozone dans la couche limite atmosphérique

Lors d'une expérience d'étude de la pollution menée dans le sud de la France (ES-COMPTE voir le site web http://escompte.mediasfrance.org/), des mesures par lidar de l'ozone et de la hauteur de couche limite ont permis de déterminer des flux d'ozone échangés par entrainement à travers le sommet de la couche mélangé. Pour cela il est nécessaire de disposer :

- Le suivi de la hauteur de couche limite à haute résolution pour déterminer h et Δh et d'une relation entre vitesse d'entrainement w_e et Δh .
- l'échelle de vitesse convective σ_w qui dépend pour les conditions étudiées principalement du flux de chaleur en surface (ceci peut être soit déduit des sorties des modéles météorologiques, soit déduit de mesures en surface lors d'une campagne)
- l'évolution temporelle du profil vertical d'ozone par exemple avec un lidar. Un exemple de mesures de l'ozone par lidar dans la couche limite est donnée dans la figure 2.9

Les résultats obtenus sur le flux d'ozone à travers le sommet de la couche limite conduisent à des valeurs de l'ordre de 3-7 ppb/h et ce flux peut être comparé à l'évolution temporelle observée de l'ozone (3 ppb/h) en tenant compte du flux de dépôt au sol (-2 ppb/h) et d'une évaluation de la production photochimique diurne moyenne d'ozone (1 ppb/hr) déduite d'un modéle chimique initialisé avec les concentrations observées des précurseurs d'ozone (NOx, Composés Organiques Volatils). Ces résultats sont résumés sur la figure 2.10

2.5 Liste des figures

FIGURE 2.1 – Structure verticale de la couche limite atmosphérique

 $\label{eq:Figure 2.2-Variation journalière des concentrations d'ozone dans la couche limite. Comparaison des observations d'un réseau de stations et d'un modéle de chimie-transport.$

FIGURE 2.3 – Profil vertical de la variation temporelle d'ozone, du terme relatif au transport vertical et de la production chimique déduit de mesures lidar et radar.

FIGURE 2.4 – Profils verticaux des paramétres moyens et des flux dans la CM (en haut). Modélisation simplifiée d'une couche limite convective avec un saut de température et de vent au sommet, des paramètres moyens constant dans la CM et une variation linéaire du flux de chaleur (en bas).

FIGURE 2.5 – Expérience pour déterminer les coefficients d'une paramétrisation de la vites se d'entrainement par l'équation 2.7

FIGURE 2.6 – Differences entre les hauteurs de CM mesurées et estimées par le modéle utilisant une paramétrisation de w_e basée sur l'équation 2.7. On en déduit les paramétres A_T et A_S .

FIGURE 2.7 – Evolution de la hauteur h mesurée par le lidar et estimée par le modéle de "grignotage" (tireté) et le modèle utilisant une paramétrisation de w_e basée sur l'équation 2.7 (trait plein). L'altitude du LCL (Lifting Condensation Level) permet de savoir si un nuage va se former au sommet de la CM (c'est à dire si h dépasse le niveau de LCL.

FIGURE 2.8 – Illustration du processus d'entrainement de la troposphère libre au sein de la couche limite en relation avec le soulévement convectif d'une masse d'air. La courbe noire représente la courbe de température moyenne de la couche limite (en haut). Evolution horizontale du sommet de la couche limite mélangée et définition de l'épaisseur EZ de la couche d'entrainement. La courbe de droite représente la variation à travers la zone d'entrainement de la fraction d'air de la troposphère libre entrainée dans la couche mélangée. Une définition de hauteur de couche limite correspondant à 50% d'entrainement est plus faible que la mesure ponctuelle d'un radiosondage qui peut être influencée par un thermique. (en bas)

FIGURE 2.9 – Exemple de mesure d'ozone par lidar lors de la campagne ESCOMPTE sur le site pollué de Marseille/Berre et comparaison avec des mesures d'ozone par ballon sonde.

FIGURE 2.10 – Evaluation du flux d'ozone échangé entre la troposphère libre et la couche limite mélangée. La courbe du haut représente l'évolution temporelle sur 12 h de la couche limite vue par un lidar et la courbe du bas l'évolution de l'ozone dans la couche limite (x) et dans la troposphère libre (*). L'augmentation observée dans la couche limite est de 3 ppb/hr et le gradient à travers la zone d'entrainement permet de calculer le flux d'ozone. La vitesse d'entrainement w_e est déduite d'une paramétrisation utilisant l'épaisseur Δh de la zone d'entrainement.