

PEPS - INSIS : BILAN MODELINEVE 2010

Modélisation par identification pour le transport des gaz trace dans le névé

Coordinateurs :

Patricia MARTINERIE¹ et Emmanuel WITRANT²

Participants :

Laurent ARNAUD¹, Pascal BELLEMAIN², Jérôme CHAPPELLAZ¹, Aurélien DOMMERGUE¹,
Didier GEORGES² et Silviu-Iulian NICULESCU³.

Laboratoires :

¹ Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement (UMR 5183)
CNRS/UJF, Grenoble

² Grenoble Image Parole Signal Automatique (UMR 5216), DAUTO
UJF/Grenoble-INP/CNRS, Grenoble

³ Laboratoire Signaux et Systèmes (UMR 8506)
CNRS/Supélec, Gif-sur-Yvette

Site web du projet :

http://www.gipsa-lab.fr/~e.witrant/projets_modelineve.html

Résumé

L'analyse de l'air interstitiel des névés polaires permet de reconstruire les historiques de nombreux gaz traces atmosphériques au cours des derniers 50-100 ans. Ceci représente un moyen unique de mieux comprendre l'impact environnemental récent de l'homme. Cette reconstruction nécessite des modèles de transport des gaz trace dans le névé. Les outils disponibles ont été développés au LGGE il y a plus de 10 ans. Bien que très utilisés, ces modèles ont montré des limitations contraignantes. Ce projet a permis de re-formuler et étendre le champ d'application de ces algorithmes, en développant des outils d'analyse propres à l'automatique. L'objectif principal a été d'explorer les propriétés de stabilité des algorithmes, l'identification sous-contrainte et l'optimisation multi-critères dans le cadre de l'étude du transport en milieu non-homogène. Ce travail a permis à la France de se positionner comme leader dans la reconstruction de scénarios atmosphériques à partir des pompages d'air dans le névé réalisés en 2008 à NEEM (Groënland). Ce grand programme international implique la plupart des nations impliquées dans les grands forages glaciaires (<http://neem.nbi.ku.dk/>).

Index Terms

Changement climatique, environnement, paléo-indicateurs glaciologiques, modélisation, transport non-homogène, optimisation EDP, systèmes distribués sous-instrumentés, identification.

I. PROBLÉMATIQUE

L'interprétation des données issues de pompage d'air dans le névé nécessite des modèles de diffusion des gaz trace dans l'air interstitiel du névé. Ces modèles s'expriment sous forme d'équations aux dérivées partielles (EDP) discrétisées (environ 500 états). Trois outils numériques sont disponibles au LGGE (Rommelaere et al., 1997 ; Fabre et al., 2000). Un modèle « direct » permet de simuler les profils de concentration dans le névé à partir d'un historique de concentrations atmosphériques. Dans ce modèle, la caractéristique principale du névé est sa diffusivité, qui apparaît comme une fonction non linéaire de l'espace (pente variable et fluctuations). Elle est calculée à l'aide d'un second code de « minimisation » : en utilisant un gaz de référence dont l'historique atmosphérique et les concentrations dans le névé au moment du forage (mesure de l'état uniquement au temps final) sont connus précisément. Finalement, un troisième code « inverse » permet d'estimer des scénarios atmosphériques à partir de profils de concentration dans le névé. Deux approches complémentaires sont utilisées : par fonction de Green et méthode de Monte Carlo.

Ces modèles sont très utilisés au LGGE et ont donné lieu à au moins 14 publications journaux dans la dernière décennie (e.g. [1], [2]). Cependant, ils ont montré plusieurs limitations importantes, associées à des problèmes de convergence, de formulation des conditions aux limites, de non linéarités et à l'absence de prise en compte de multiples sources de données. Notre objectif est donc de revoir les trois codes pour s'affranchir de leurs limitations et de les étendre à des sources de données multiples.

II. RÉSULTATS PRINCIPAUX

A. *Modèle direct et physique du transport [3]*

La première étape a été une révision du modèle du névé et des spécificités du transport des gaz traces (appelé « modèle direct »). Le névé a ainsi été décrit comme un réseau interconnecté de glace, bulles et gaz libre, avec la densité de chacune des parties contrainte par la conservation de la masse. Les variations de densité de la glace étant sur une échelle de temps beaucoup plus lente, l'accumulation neigeuse (condition limite pour la glace) a pu être supposée constante et les phénomènes dynamiques des gaz libres représentés par une unique équation aux dérivées partielles (EDP) de transport. Bien que les variations de densité dans la partie diffusible du névé (de 5 à 62 m de profondeur environ pour NEEM) soient bien représentées par la loi de Fick (flux déterminé par le gradient de concentration), ceci ne permettait pas de représenter les variations dans les régions quasi-stagnantes du névé (zone de fermeture des bulles, 62-80 m) et des phénomènes particuliers apparaissaient dans la partie haute, avec dominance d'un comportement tourbillonnaire. Une nouvelle formulation de la dynamique du transport, contraignant le modèle à suivre la loi de Darcy (flux déterminé par les forces externes) en régime quasi-statique et une diffusivité tourbillonnaire en surface, nous a permis de résoudre ce problème. Ceci a permis de simuler correctement les variations du rapport $15N/14N$ en fonction de la profondeur dans la partie basse des névés polaires. Ce résultat a des implications importantes pour l'interprétation des carottes de glace profonde, car le rapport $15N/14N$ est fréquemment utilisé comme traceur de la différence d'âge entre la glace et les gaz qui y sont occlus.

Une des limites du modèle précédent, empêchant la convergence des techniques d'optimisation, était la sensibilité d'intégration des dynamiques du modèle discrétisé. Une étude spécifique des propriétés de stabilité et de précision (diffusion numérique) des schémas de discrétisation, mise en application sur différents gaz et sites de forage, nous permet maintenant d'assurer un comportement stable et uniforme du modèle, permettant ainsi la convergence des techniques d'optimisation.

B. *Modèle inverse diffusivité et optimisation EDP*

L'objectif du modèle inverse diffusivité est de reconstruire le profil de diffusivité du névé (variant dans l'espace et constant dans le temps) à partir du modèle direct et des mesures de concentration des gaz dans le névé (temps final du modèle). Cette objectif a été formulé comme un problème des moindres carrés pondérés contraint par la dynamique bilinéaire (couplage entre la diffusivité et la concentration de gaz trace) du modèle direct.

Les contributions majeures ont été [3] :

- une optimisation "multi-gaz" permettant de prendre en compte la contribution simultanée de différentes espèces chimiques dans la détermination du profil de diffusivité ;
- l'utilisation d'une technique d'optimisation non-linéaire sur le modèle discrétisé qui, après révision du modèle direct décrite précédemment, permet une convergence de la diffusivité optimale vers un état stationnaire ;
- l'expression de l'impact de l'incertitude du scénario atmosphérique (condition limite de l'EDP) sur l'estimation de la concentration finale, permettant ainsi d'inclure l'incertitude scénario dans les pondérations des moindres carrés au même titre que les erreurs de mesure.

Une approche analytique du problème d'optimisation a également été proposée [4] dans le cadre du formalisme EDP pour garantir les propriétés de convergence de l'algorithme, en termes d'unicité des solutions et pour améliorer la vitesse de convergence. Des résultats ont ainsi été obtenus pour la linéarisation de l'EDP, le calcul de l'état adjoint (approche Lagrangienne) et la mise en place d'un algorithme de descente du gradient. Leur application (sur un cas test pour l'instant) reste à effectuer pour le cas multi-gaz et à tester sur différents sites de forage.

13 opérations de forage et pompage d'air dans les névés Arctiques et Antartiques ont été simulées à ce jour, pour permettre la reconstruction avec contrainte multi-sites des tendances atmosphériques passées des constituants atmosphériques. Des tests de sensibilité ont montré que l'optimisation "multi-gaz" mise en oeuvre pour le calcul de la diffusivité permet d'obtenir une solution beaucoup plus robuste. L'amélioration des résultats est particulièrement spectaculaire au site de Devon Island (Canada). L'optimisation "multi-gaz" permet de simuler les irrégularités des concentrations gazeuses liées à la présence de couches de fusion/regel, ce que ne permettait pas la méthode "mono-gaz" précédemment mise en oeuvre [2].

C. *Inverse scénario*

La reconstruction des tendances atmosphériques passées des gaz trace à partir de leurs profils de concentrations dans le névé représente un enjeu important pour la communauté glaciologique. Les développements essentiels de la méthode précédemment utilisée au LGGE [5] ont été réalisés en 2009 suite au montage d'un premier projet de collaboration LGGE GIPSA-lab LSS (demande PEPS ST2I évaluée favorablement mais non financée). Il s'agissait de l'étendre aux isotopes et à la prise en compte simultanée de forages réalisés à des dates très différentes (entre 1993 et 2008). Les développements réalisés en 2010 ont principalement visé à faciliter la mise en oeuvre du modèle pour un grand nombre d'espèces mesurées en un nombre variable de sites (développement d'un environnement shell-script autour du code). La qualité des résultats a été fortement améliorée par les développements décrits aux paragraphes précédents : elle dépend directement de la précision du modèle direct et de la diffusivité utilisée pour le contraindre.

Un résultat a été publié en 2010 : la première reconstruction des concentrations atmosphériques en HFC-227ea (1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropane), un substitut des composés détruisant la couche d’ozone. Le scénario atmosphérique reconstruit à partir des mesures au site de NEEM indiquent des niveaux atmosphériques détectables depuis les années 1990 et une augmentation continue de sa concentration jusqu’en 2008 [6].

Les développements méthodologiques et leur validation, ainsi que les résultats pour le monoxyde de carbone, le mercure, les isotopes de CO et CH₄ sont en cours de finalisation et seront publiés en 2011. La simulation du CH₃CCl₃ constitue un autre test intéressant : cette espèce de courte durée de vie atmosphérique, interdite par le protocole de Montréal, a un historique atmosphérique "en cloche" très marqué. Les bons résultats obtenus pour ce gaz ouvrent des perspectives concernant l’estimation de l’effet de lissage du névé sur les signaux atmosphériques passés, en particulier les variations rapides du climat observées en période glaciaire.

III. EXPLORATIONS ET PERSPECTIVES

A. Méthodologies de modélisation et modèles réduits

En parallèle des résultats précédents, directement appliqués à la problématique, certaines études ont été effectuées ou initiées afin de réduire la complexité de calcul :

- une approche de type “systèmes à retards” permettant de représenter sous forme de noyau retardé les phénomènes convectifs et dissipatifs à paramètres temps-variant [7] ;
- une approche de réduction de modèle par méthode fréquentielle (collaboration avec KTH).

B. Perspectives

Pour les perspectives directes :

- implication forte dans un numéro spécial NEEM de la revue Atmospheric Chemistry and Physics en 2011 (deux articles 1er auteur, participation forte à au moins cinq autres articles) ;
- reformulation du modèle discrétisé sous une forme linéaire à paramètres variants (LPV) pour une approche d’optimisation utilisant la méthode du type point fixe ;
- finalisation de l’approche Lagrangienne d’optimisation EDP et influence des fonctions de régularisation.

RÉFÉRENCES

- [1] D. R. Worton, W. T. Sturges, L. K. Gohar, K. P. Shine, P. Martinerie, D. E. Oram, S. P. Humpfrey, P. Begley, L. Gunn, J.-M. Barnola, J. Schwander, et R. Mulvaney, “Atmospheric trends and radiative forcings of cf₄ and c₂f₆ inferred from firn air,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 41, pp. 2184–2189, 2007.
- [2] P. Martinerie, E. Nourtier-Mazauric, J.-M. Barnola, W. T. Sturges, D. R. Worton, E. Atlas, L. K. Gohar, K. P. Shine, and G. P. Brasseur, “Long-lived halocarbon trends and budgets from atmospheric chemistry modelling constrained with measurements in polar firn,” *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 9, pp. 3911–3934, 2009.
- [3] E. Witrant, P. Martinerie, J. Severinghaus, and et al., “Multi-gas nonhomogeneous transport in firns,” Soumission prévue à *Atmospheric Chemistry and Physics*, 2011, NEEM special issue.
- [4] E. Witrant and P. Martinerie, “A variational approach for imal diffusivity identification in firns,” in *Proc. of the 18th Med. Conf. on Control and Automation*, Marrakech, Morocco, June 2010, pp. 892–897.
- [5] V. Rommelaere, L. Arnaud, and J. Barnola, “Reconstructing recent atmospheric trace gas concentrations from polar firn and bubbly ice data by inverse methods,” *Journal of Geophysical Research*, vol. 102, no. D25, pp. 30069–30083, 1997.
- [6] J. Laube, P. Martinerie, E. Witrant, T. Blunier, J. Schwander, C. Brenninkmeijer, T. J. Schuck, M. Bolder, T. Röckmann, C. van der Veen, H. Bönisch, A. Engel, G. Mills, M. J. Newland, D. E. Oram, C. E. Reeves, and W. T. Sturges, “Accelerating growth of HFC-227ea (1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropane) in the atmosphere,” *Atmospheric Chemistry and Physics*, vol. 10, pp. 5903–5910, 2010.
- [7] E. Witrant and S.-I. Niculescu, “Modeling and control of large convective flows with time-delays,” *Mathematics in Engineering, Science and Aerospace*, vol. 1, no. 2, pp. 191–205, 2010.

IV. PUBLICATIONS (EN ANNEXE)

1 conférence internationale avec comité de relecture [4] et 2 articles de journaux internationaux publiés [7], [6], 7 articles en préparation (2 en 1^{er} auteur) dans un numéro spécial NEEM de la revue Atmospheric Chemistry and Physics en 2011.